15,14

Термомеханический режим формирования вихревых течений в гибридно ориентированном нематическом канале

© А.В. Захаров

Институт проблем машиноведения РАН,
Санкт-Петербург, Россия

E-mail: alexandre.zakharov@yahoo.ca

Поступила в Редакцию 15 января 2019 г.
В окончательной редакции 15 января 2019 г.
Принята к публикации 15 января 2019 г.

Численными методами, в рамках нелинейного обобщения классической теории Эриксена–Лесли, допускающей учет термомеханических вкладов как в выражение для сдвигового напряжения, так и в уравнение баланса энтропии, описаны несколько сценариев формирования вихревых течений (ВТ) в микроразмерных гибридно-ориентированных жидкокристаллических (ГОЖК)-каналах с ориентационными дефектами. Анализ численных результатов показал, что ГОЖК-канале два либо один вихрь, хотя на начальном этапе формирования ВТ зарождаются два вихря, направленные навстречу друг другу.

Работа выполнена при финансовой поддержке Минобрнауки (гранты 3.11888.2018/11.12 и 3.9585.2017/8.9).

DOI: 10.21883/FTT.2019.06.47699.358

1. Введение

В последнее время все чаще методы микро- и нанофлуидистики находят применение не только при исследовании процессов транспортировки и сортировки нанолитровых объемов молекулярных жидкостей [1–4], но и в разнообразных семействах сенсоров и датчиков на основе термо- и лиотропных жидкокристаллических (ЖК) материалов [3,5]. Еще одной не менее интригующей областью применения микролитровых объемов ЖК-материалов являются биометрические оптические системы, где основным элементом являются ЖК-линзы с регулируемым фокусным расстоянием (tunable liquid crystal microlenses) [6,7]. Один из способов, позволяющий манипулировать такими микроразмерными молекулярными системами, основывается на использовании электрического поля [8]. Другой способ, позволяющий транспортировать микролитровые объемы молекулярных жидкостей, основан на формировании разности градиентов поверхностного натяжения (ГПН) на границах раздела жидкость/газ и жидкость/твердое тело [9]. Эта разность ГПН может быть создана посредством локального разогрева ограниченного объема жидкости, например, с помощью сфокусированного лазерного излучения. Эти вышеописанные методы транспортировки микролитровых объемов одинаково применимы как для молекулярных жидкостей, так и для манипулирования микролитровыми объемами ЖК-материалов. Отличительной особенностью ЖК-систем от изотропных молекулярных жидкостей является то, что при определенных термодинамических условиях в ЖК-системах формируется ориентационное упорядочение молекул, которое описывается полем директора $\hat{\mathbf{n}}$ [10]. Было показано, что взаимодействие градиентов поля директора $\nabla\hat{\mathbf{n}}$ и температуры ∇T ведет к формированию устойчивого гидродинамического потока $\mathbf{v}$ ЖК-материала [11]. Величина этого потока пропорциональна сдвиговой составляющей термомеханического вклада σ_{zx}^{tm} в тензор напряжения (ТН) $v \sim \frac{d}{\eta}\,\sigma_{zx}^{tm}$, где $\sigma_{zx}^{tm} \sim \xi\,\frac{\Delta T}{d^2}$, η — сдвиговая вязкость ЖК-материала, $\Delta T = T_2 - T_1 > 0$, а область температур $[T_2, T_1]$ находится в пределах стабильности нематической фазы толщиной d, в то время как ξ — термомеханическая постоянная [12]. Если локальный градиент температуры в объеме ЖК-фазы легко формируется с помощью лазерного излучения, то градиент поля директора удается сформировать посредством гибридной ориентации ЖК (ГОЖК)-фазы, в которой ориентация поля директора на одной из поверхностей планарная, а на другой — гомеотропная. Все это указывает на то, что существует возможность немеханической транспортировки микролитровых объемов ЖК-материала под действием сфокусированного лазерного излучения. Но нужно принять во внимание тот факт, что в микроразмерных объемах ЖК-материала всегда присутствует какое-то количество ориентационных дефектов (ОД), которые влияют на процесс транспортировки ЖК-материалов. Степень влияния ОД, а также величины и направления теплового потока $\mathbf{q}$, инициируемого лазерным излучением на характер возбуждаемого гидродинамического течения в микроразмерном ЖК-канале, будет исследована в рамках нелинейного обобщения классической теории Эриксена-Лесли [13,14], с учетом баланса энтропии [15].

2. Основные уравнения

Рассмотрим длинный прямоугольный ЖК-канал с размерами $2D$ и $2d$ ($D \gg d$), ограниченный твердыми горизонтальными и вертикальными поверхностями. Допустим, что директор планарно ориентирован на верхней и двух боковых поверхностях, и гомеотропно на нижней поверхности. Рассмотрим систему координат, отсчитываемую от середины ЖК-канала так, что ось X и орт $\hat{\mathbf{i}}$ совпадают с направлением директора на верхней ограничивающей поверхности ($\hat{\mathbf{i}} \parallel \hat{\mathbf{n}}_{z=d}$), в то время как ось Z и орт $\hat{\mathbf{k}}$ направлены ортогонально ($\hat{\mathbf{k}} \perp \hat{\mathbf{n}}_{z=d}$), а орт $\hat{\mathbf{j}} = \hat{\mathbf{k}} \times \hat{\mathbf{i}}$. Будем предполагать, что переориентация поля директора $\hat{\mathbf{n}} = (n_x, 0, n_z) = \sin\theta\hat{\mathbf{i}} + \cos\theta\hat{\mathbf{k}}$ под действием градиента температуры ∇T, формирующегося за счет сфокусированного лазерного излучения, осуществляется в плоскости XZ. Здесь $\theta \equiv \theta(x, z, t)$ — полярный угол, образованный директором $\hat{\mathbf{n}}$ и ортом $\hat{\mathbf{k}}$. Далее мы будем использовать безразмерные пространственные координаты $\overline{x} = \frac{x}{d}$ и $\overline{z} = \frac{z}{d}$, причем в дальнейшем верхняя черта будет опущена.

В настоящей работе предлагается новый подход описывающий механизм формирования вихревого течения в микроразмерном ГОЖК-канале под действием потока тепла $\mathbf{q}$, направленного под углом α к нижней ограничивающей поверхности канала, содержащей ориентационный дефект. Этот ОД характеризуется непрерывным изменением поля директора от гомеотропной ориентации к планарной, и обратно к гомеотропной. Таким образом, вдоль нижней ограничивающей поверхности ГОЖК-канала формируется градиент $\nabla\theta$, то есть

$$\theta_{-10 \le x \le -L, z=-1} = \theta_{L \le x \le 10, z=-1} = 0,$$

$$\theta_{-L<x<L, z=-1} = \mathscr{A}, \tag{1}$$

где $\mathscr{A} = \tan^{-1}\left(\frac{L^2 - x^2}{4x^4}\right)$, $L = \frac{l}{d}$, и $2l$ — линейный размер ОД на нижней ограничивающей поверхности, в то время как на остальных поверхностях директор ориентирован планарно, то есть

$$\theta_{x=\pm 10, -1<z<1} = 0, \quad \theta_{-10 \le x \le 10, z=1} = \frac{\pi}{2}. \tag{2}$$

В дальнейших расчетах будем считать, что отношение D/d равно 10. Для того чтобы понять, какую роль играет тепловой поток $\mathbf{q} = q_z\hat{\mathbf{k}} = \mathscr{Q}\sin\alpha\hat{\mathbf{k}}$ в формировании вихревого течения в микроразмерном ГОЖК-канале, предположим, что лазерное излучение сфокусировано на нижней ограничивающей поверхности содержащей ориентационный дефект. Здесь α — угол образованный вектором $\hat{\mathbf{q}}$ и ортом $\hat{\mathbf{i}}$, а функция

$$\mathscr{Q}(x, z) = \mathscr{Q}_0 \exp\left(-2\,\frac{(x-x_0)^2 + (z-z_0)^2}{\Delta}\right)\mathscr{H}(\tau_{\text{in}} - \tau) \tag{3}$$

описывает распределение инжектируемой энергии в микроразмерном ГОЖК-канале, в то время как $\mathscr{Q}_0$ — безразмерная мощность теплового потока, $\Delta = \frac{\omega_0}{d} = 2L$ — размер Гауссового пятна лазерного излучения, x_0 и z_0 — координаты его центра соответственно, $\mathscr{H}(\tau_{\text{in}} - \tau)$ — функция Хэвисайда, $\tau = \frac{t}{t_R}$ — безразмерное время в течении которого протекает процесс формирования вихревого течения, τ_{in} — характерное безразмерное время накачки лазерного излучения в ЖК-фазу. Граничное условие для безразмерной температуры $\chi \equiv \chi(x, z, \tau) = T(x, z, \tau)/\mathrm{NI}$ может быть записано в виде

$$(\chi_{,z}(x, z, \tau))_{z=-1} = \left[\frac{q_z - (\lambda - 1)\, n_x n_z \chi_{,x}}{\lambda n_z^2 + n_x^2}\right]_{z=-1}, \tag{4}$$

в то время как температура на остальных ограничивающих поверхностях постоянна и равна

$$\chi_{-10 \le x \le 10, z=1} = \chi_{x \pm 10, -1<z<1} = \chi_c. \tag{5}$$

Здесь $\lambda = \lambda_{\parallel}/\lambda_{\perp}$, $\lambda_{\parallel}$ и $\lambda_{\perp}$ — коэффициенты теплопроводности ЖК-фазы в направлении параллельном и перпендикулярном направлению директора $\hat{\mathbf{n}}$, $\chi_{,x} = \frac{\partial\chi}{\partial x}$, и T_{NI} — температура фазового перехода нематик–изотропная фаза соответственно. В нашем случае поле скорости $\mathbf{v} = u\hat{\mathbf{i}} + w\hat{\mathbf{k}}$ удовлетворяет граничным условиям

$$u_{-10 \le x \le 10, z=-1} = u_{x=\pm 10, -1<z<1} = 0,$$

$$w_{-10 \le x \le 10, z=-1} = w_{x \pm 10, -1<z<1} = 0, \tag{6}$$

где $u \equiv v_x(x, z, \tau)$ и $w \equiv v_z mx, z, \tau)$ — являются компонентами вектора скорости $\mathbf{v}$. Принимая во внимание тот факт, что толщина ЖК-канала варьируется в пределах нескольких микрометров, будем считать, что плотность ЖК-фазы постоянна по сечению канала ($\rho = \mathrm{const}$). Таким образом, мы имеем дело с несжимаемой ЖК-фазой, и условие несжимаемости $\nabla \cdot \mathbf{v} = 0$, которое принимает вид

$$u_{,x} + w_{,z} = 0, \tag{7}$$

выполняется за счет введения функции тока ψ, где $u = \psi_{,z}$, а $w = -\psi_{,x}$ соответственно.

В нашем случае безразмерные уравнения баланса угловых и линейных моментов, действующих на единицу объема ЖК-фазы, а также баланса энтропии имеют вид (см. Приложение и ссылку [16])

$$\begin{aligned}
n_z n_{x,\tau} - n_x n_{z,\tau} = {} & \delta_1\big[n_z\mathscr{M}_{0,x} - n_x\mathscr{M}_{0,z} \\
& + K_{31}\,(n_z f_{,z} + n_x f_{,x})\big] - \frac{1}{2}\,\psi_{,xx}\big[1 + \gamma_{21}\big(n_x^2 - n_z^2\big)\big] \\
& - \frac{1}{2}\,\psi_{,zz}\big[1 - \gamma_{21}\big(n_x^2 - n_z^2\big)\big] \cdot 2\gamma_{21}\psi_{,xz} n_x n_z \\
& + \psi_{,z}\mathscr{N}_x + \mathscr{N}_z\psi_{,x} + \delta_2\big(\chi_{,x}\mathscr{L}_{,x} + \chi_{,z}\mathscr{L}_{,z}\big).
\end{aligned} \tag{8}$$

$$\begin{aligned}
\delta_3\psi_{,xz\tau} = {} & a_1\psi_{,zzzz} + a_2\psi_{,xzzz} + a_3\psi_{,xxzz} + a_4\psi_{,xxxz} \\
& + a_5\psi_{,xxxx} + a_6\psi_{,zzz} + a_7\psi_{,xzz} + a_8\psi_{,xxz} + a_9\psi_{,xxx} \\
& + a_{10}\psi_{,zz} + a_{11}\psi_{,xz} + a_{12}\psi_{,xx} + \mathscr{F},
\end{aligned} \tag{9}$$

$$\begin{aligned}
\chi_{,\tau} = {} & \big[\chi_{,x}\big(\lambda n_x^2 + n_z^2\big) + (\lambda - 1)n_x n_z\chi_{,z}\big]_{,x} \\
& + \big[\chi_{,z}\big(\lambda n_z^2 + n_x^2\big) + (\lambda - 1)n_x n_z\chi_{,x}\big]_{,z} \\
& + \delta_4\chi\left(\nabla \cdot \frac{\partial\mathscr{R}^{tm}}{\partial\nabla\chi}\right) - \psi_{,z}\chi_{,x} + \psi_x\chi_{,z},
\end{aligned} \tag{10}$$

где $\mathscr{M}_0 = \nabla \cdot \hat{\mathbf{n}}$, $K_{31} = K_3/K_1$ — отношение коэффициентов упругости продольного и поперечного изгибов,

$\gamma_{21}=\gamma_2/\gamma_1$ — отношение коэффициентов вращательной вязкости, $\bar{\psi}=\frac{t_T}{d^2}\psi$ — безразмерная функция тока ψ для поля скорости $\mathbf{v}=u\hat{\mathbf{i}}+w\hat{\mathbf{k}}=-\nabla\times\hat{\mathbf{j}}\psi$, $\tau=\frac{t}{t_T}$ — безразмерное время, а $t_T=\frac{\rho C_p d^2}{\lambda_\perp}$ — характерное время используемое для нормировки. Выражения для функции $\mathscr{F}=\left(\sigma_{xx}^{el}+\sigma_{xx}^{tm}-\sigma_{zz}^{el}-\sigma_{zz}^{tm}\right)_{,xz}+\left(\sigma_{zx}^{el}+\sigma_{zx}^{tm}\right)_{,zz}-\left(\sigma_{xz}^{el}+\sigma_{xz}^{tm}\right)_{,xx}$ и коэффициентов a_i $(i=1,\ldots,12)$, а также выражения для термомеханического σ_{ij}^{tm} $(i,j=x,z)$ и упругого σ_{ij}^{el} $(i,j=x,z)$ вкладов в полный тензор напряжения σ_{ij} $(i,j=x,z)$ даны в Приложении и в ссылке [16]. Вспомогательные функции имеют вид: $f=n_{x,z}-n_{z,x}$, $n_{z,\tau}=\frac{\partial n_z}{\partial\tau}$, $\mathscr{N}_z=n_z n_{x,z}-n_x n_{z,z}$, $\mathscr{L}_x=n_x n_{z,x}-\frac{3}{2}n_z n_{x,x}+\frac{1}{2}n_x n_{x,z}$, $\mathscr{L}_z=-n_z n_{x,z}+\frac{3}{2}n_x n_{z,z}-\frac{1}{2}n_z n_{z,x}$. В системе уравнений (8)–(10) и в последующем изложении черта над безразмерной функцией тока опущена. Безразмерный термомеханический вклад в функцию Рэлея $\mathscr{R}^{tm}$ может быть записан в виде (детали изложены в Приложении и в ссылке [16])

$$\mathscr{R}^{\mathrm{tm}}=\chi_{,x}\bigg(-\frac{1}{2}n_z\mathscr{M}_0-n_zM_{xx}+n_x^2\big(n_xM_{zz}-M_{xx}n_z+2n_xM_{xz}\big)\bigg)+\chi_{,z}\bigg(\frac{1}{2}n_x\mathscr{M}_0+n_xM_{zz}+n_z^2\big(n_xM_{zz}-M_{xx}n_x-2n_zM_{xz}\big)\bigg),\qquad(11)$$

где M_{ij} $(i,j=x,z)$ — компоненты тензора $\mathbf{M}=\frac{1}{2}\left[\nabla\hat{\mathbf{n}}+(\nabla\hat{\mathbf{n}})^T\right]$. Система уравнений (8)–(10) характеризуется набором параметров $\delta_1=\frac{t_TK_1}{\gamma_1d^2}$, $\delta_2=\frac{\rho C_pT_{NI}}{\lambda_\perp}\frac{\xi}{\gamma_1}$, $\delta_3=\frac{\rho d^2}{\gamma_1 t_T}$, и $\delta_4=\frac{\xi}{\lambda_\perp t_T}$. Здесь $\xi=10^{-12}$ [J/mK] — термомеханическая постоянная [12].

Эволюция поля директора и скорости под действием градиента температуры $\nabla\chi$ может быть описана системой нелинейных дифференциальных уравнений в частных производных (8)–(10) и должна быть дополнена граничными условиями, как для поля директора и температуры, так и для функции тока

$$(n_x)_{x=\pm10,-1\le z\le1}=0,\qquad(n_x)_{-10<x<10,z=1}=1,$$
$$(n_x)_{-10<x<-L,z=-1}=(n_x)_{L<x<10,z=-1}=0,$$
$$(n_x)_{-L<x<L,z=-1}=\sin\mathscr{A},$$
$$\chi_{x=\pm10,-1\le z\le1}=0.97,\qquad\chi_{-10<x<10,z=1}=0.97,$$
$$(\chi_{,z}(x,z,\tau))_{z=-1}=\left[\frac{q_z-(\lambda-1)n_xn_z\chi_{,x}}{\lambda n_z^2+n_x^2}\right]_{z=-1},$$
$$(\psi_{,x})_{x=\pm10,-1\le z\le1}=(\psi_{,z})_{x=\pm10,-1\le z\le1}=0,$$
$$(\psi_{,x})_{-10\le x\le10,z=-1}=(\psi_{,z})_{-10\le x\le10,z=-1}=0.\qquad(12)$$

В свою очередь, начальное условие для поля директора имеет вид

$$\hat{\mathbf{n}}(x,z,\tau=0)=\hat{\mathbf{n}}_{\mathrm{elas}}^{eq}(x,z),\qquad(13)$$

в то время как начальные условия для функции тока и температуры могут быть записаны в виде

$$\psi(x,z,\tau=0)=0,\qquad(14)$$

и

$$\chi(x,z,\tau=0)=0.97\qquad(15)$$

соответственно.

В случае ЖК-системы, образованной молекулами 4-n'-пентил-n'-цианобифенила (5ЦБ), температурный интервал существования нематической фазы соответствует $297\le T\le308$ K. В этом интервале температур величины параметров оцениваются как $\delta_1\sim10^{-3}$, $\delta_2\sim0.3$, $\delta_3\sim10^{-6}$, и $\delta_4\sim10^{-4}$ соответственно. Поэтому с учетом того, что $\delta_3\ll1$, уравнение (9) принимает вид

$$a_1\psi_{,zzzz}+a_2\psi_{,xzzz}+a_3\psi_{,xxzz}+a_4\psi_{,xxxz}+a_5\psi_{,xxxx}+a_6\psi_{,zzz}+a_7\psi_{,xzz}+a_8\psi_{,xxz}+a_9\psi_{,xxx}+a_{10}\psi_{,zz}+a_{11}\psi_{,xz}+a_{12}\psi_{,xx}+\mathscr{F}=0.\qquad(16)$$

3. Решение гидродинамических уравнений и основные результаты

Процесс термомеханического формирования вихревого течения в ГОЖК-канале под действием лазерного излучения сфокусированного на нижней границе канала, содержащей ОД, описывается системой нелинейных дифференциальных уравнений в частных производных (8), (16) и (10) совместно с граничными (12) и начальными условиями, как для поля директора (13) и функции тока (14), так и для температуры (15) соответственно. Здесь равновесное распределение поля директора $\hat{\mathbf{n}}_{\mathrm{elast}}^{\mathrm{eq}}(x,z)$ получено в результате решения уравнения (8) при условии, что отсутствуют течение и градиенты температуры $\psi_{,x}=\psi_{,z}=\chi_{,x}=\chi_{,z}=0$. Граничное условие для поля директора $\hat{\mathbf{n}}_{\mathrm{elast}}^{\mathrm{eq}}(x,z)$ имеет вид

$$(n_x)_{x=\pm10,-1\le z\le1}=0,\qquad(n_x)_{-10<x<10,z=1}=1,$$
$$(n_x)_{-10<x<-L,z=-1}=(n_x)_{L<x<10,z=-1}=0,$$
$$(n_x)_{-L<x<L,z=-1}=\sin\mathscr{A},\qquad(17)$$

а начальное условие может быть записано как

$$\theta_{\mathrm{elast}}(x,z,\tau=0)=\begin{cases}0, & -1\le z\le1,\quad x=\pm10,\\ \frac{\pi}{4}(z+1), & -10<x<-L,\quad L<x<10,\\ \frac{\pi}{2}, & z=-1,\quad -L<x<-L.\end{cases}$$

Формирование вихревого течения в ГОЖК-канале под действием лазерного излучения сфокусированного на

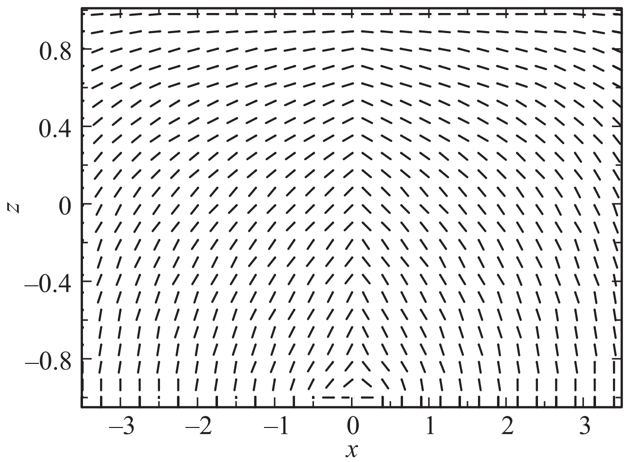

Рис. 1. Фрагмент распределения поля директора $\hat{\mathbf{n}}^{\rm eq}_{\rm elast}(x, z)$ в ГОЖК-канале вблизи ОД, локализованного на нижней границе $-L < x < L$, $z = -1$ канала в начальный момент времени $\tau = 0$. Здесь $L = \pm 0.5$.

нижней границе было исследовано численно методом релаксаций [17], а критерием сходимости итерационной процедуры был выбран $\epsilon = |(\theta_{m+1} - \theta_m)/\theta_m| \sim 10^{-4}$. Здесь m- номер итерации.

На рис. 1 представлены результаты расчета распределения поля директора $\hat{\mathbf{n}}^{\rm eq}_{\rm elast}(x, z)$ в ГОЖК-канале вблизи ОД, локализованного на нижней границе $(-L < x < L$, $z = -1)$ канала в начальный момент времени $\tau = 0$. Здесь $L = \pm 0.5$ — соответствует правой и левой границам ориентационного дефекта соответственно. Согласно расчетам, наибольшее изменение величины $\nabla\theta_{\rm eq}(x, z)$ достигается вблизи ОД, и его влияние простирается практически на $1/3$ объема ЖК-канала, достигая точки с координатой $x = 0$, $z = 0.8$. Располагая начальным распределением поля директора $\hat{\mathbf{n}}^{\rm eq}_{\rm elast}(x, z)$, с помощью уравнения (10) и условия отсутствия скорости $(\psi)_x = (\psi)_z = 0$, было рассчитано поле температуры $\chi(x, z, \Delta\tau)$ соответствующее следующему шагу по времени $\Delta\tau$. Это, в свою очередь, позволило рассчитать функцию $\mathscr{F}$ и функцию тока $\psi(x, z, \Delta\tau)$. Следующий шаг по времени $\Delta\tau$ для распределения поля директора, скорости и температуры по объему ГОЖК-канала был осуществлен с помощью сеточного метода [18], причем устойчивость численной процедуры определялась из условия

$$\frac{\Delta\tau}{\delta_3}\left(\frac{1}{(\Delta x)^2} + \frac{1}{(\Delta z)^2}\right) \le \frac{1}{2},$$

$$\frac{3a_5}{(\Delta x)^4} - \frac{2a_1}{(\Delta z)^4} > 0,$$

где Δx и Δz — приращения пространственных переменных, а коэффициенты a_1 и a_5 приведены в Приложении ссылки [16].

Эволюция распределения поля скорости $\mathbf{v}(x, z, \tau) = u(x, z, \tau)\hat{\mathbf{i}} + w(x, z, \tau)\hat{\mathbf{k}}$ в микроразмерном ГОЖК-канале под действием потока тепла $\mathbf{q}$, направленного под углом α к нижней границе канала, содержащего ОД, представлена на рис. 2–4. Для того чтобы понять какую роль играет тепловой поток

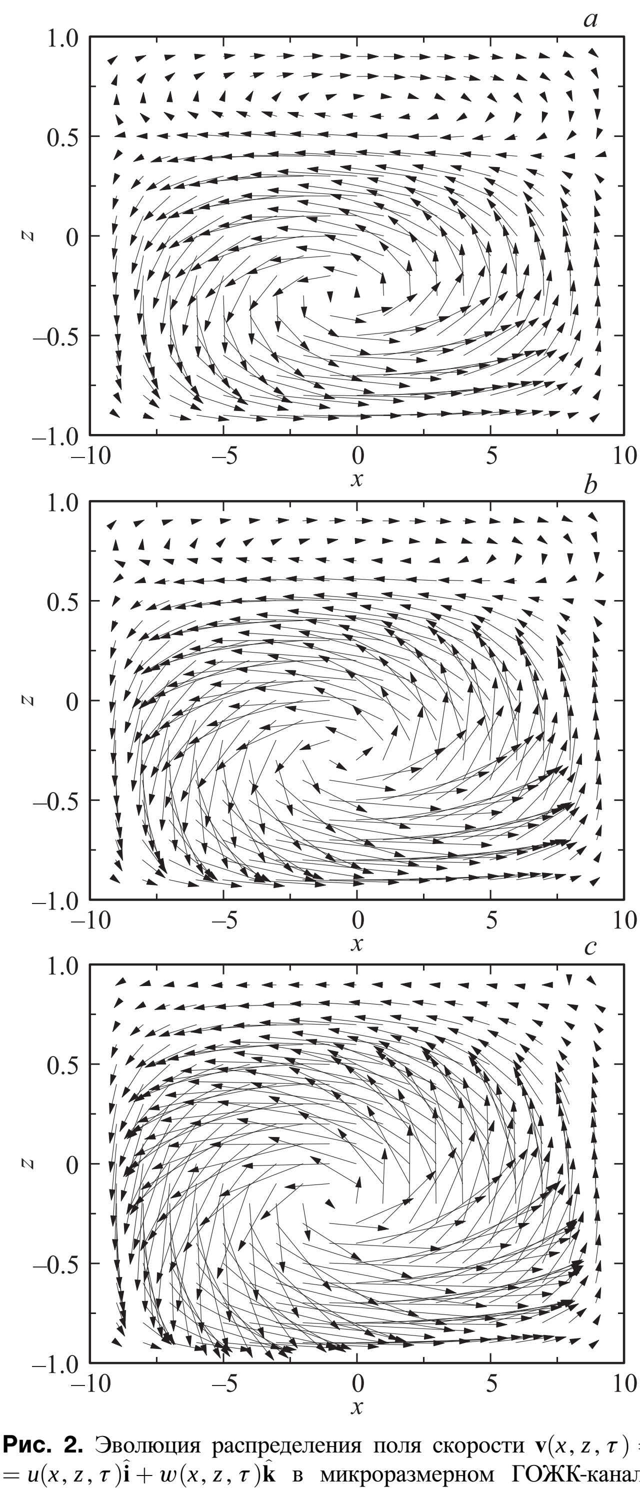

Рис. 2. Эволюция распределения поля скорости $\mathbf{v}(x, z, \tau) = u(x, z, \tau)\hat{\mathbf{i}} + w(x, z, \tau)\hat{\mathbf{k}}$ в микроразмерном ГОЖК-канале под действием потока тепла $\mathbf{q}$ направленного под углом $\alpha = 20^\circ$ к нижней границе канала содержащего ОД, для трех значений времени τ: (*a*) $\sim 10^{-5}$ ($\sim 18\,\mu$s), (*b*) $\sim 4 \cdot 10^{-5}$ ($\sim 72\,\mu$s) и (*c*) $\tau_{\rm in} \sim 1.6 \cdot 10^{-4}$ (~ 0.29 ms) соответственно. Стрелке длиной в 1 mm соответствует величина вектора скорости, равная $1.8\,\mu$m/s.

$\mathbf{q} = q_z\hat{\mathbf{k}} = \mathcal{Q}\sin\alpha\hat{\mathbf{k}}$ в формировании вихревого течения в микроразмерном ГОЖК-канале предположим, что этот поток $\mathbf{q}$ формируется под действием направленного лазерного излучения, сфокусированного по всей длине $-L < x < L$, $z = -1$ ОД на нижней границе ЖК-канала. При этом время накачки τ_{in} лазерного излучения мощностью $\mathcal{Q}_0 = 0.05$ $(\sim 4.2 \cdot 10^{-4}\,\text{mW}/\mu\text{m}^2)$ равно $1.6 \cdot 10^{-4}$ $(\sim 0.29\,\text{ms})$.

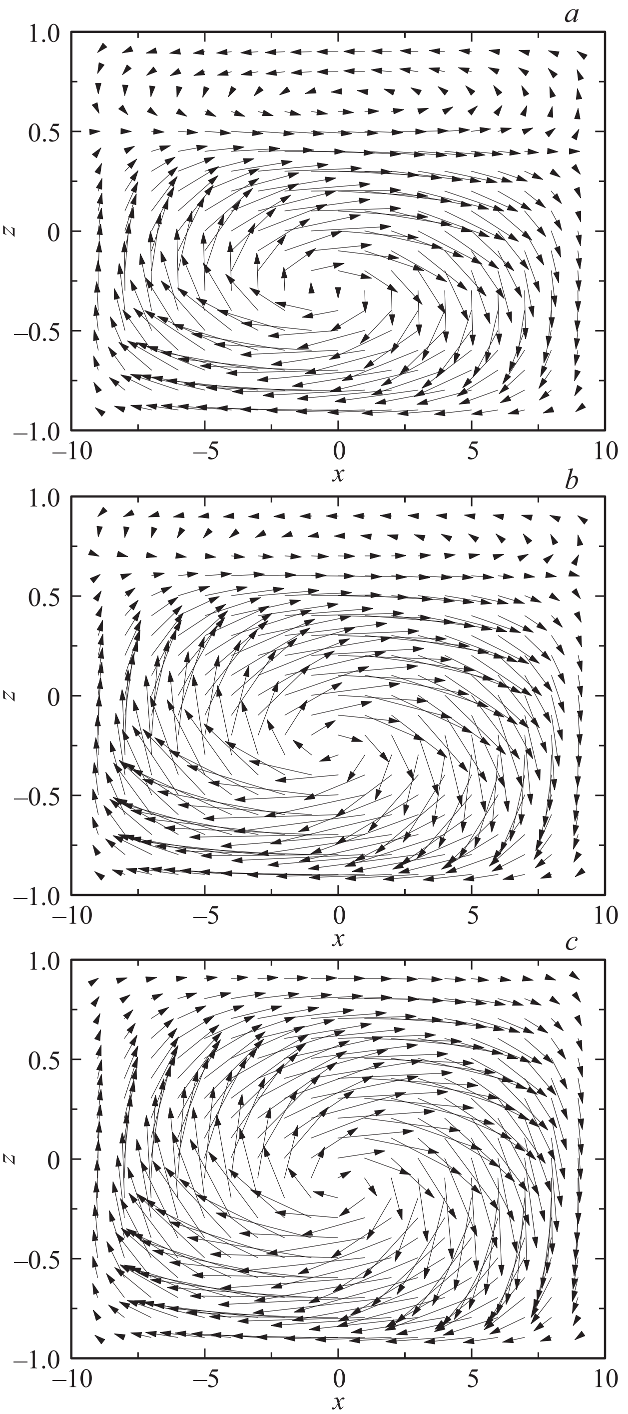

Рис. 3. То же, что на рис. 2, для потока тепла $\mathbf{q}$, направленного под углом $\alpha = 160^\circ$ к нижней границе канала, содержащего ОД.

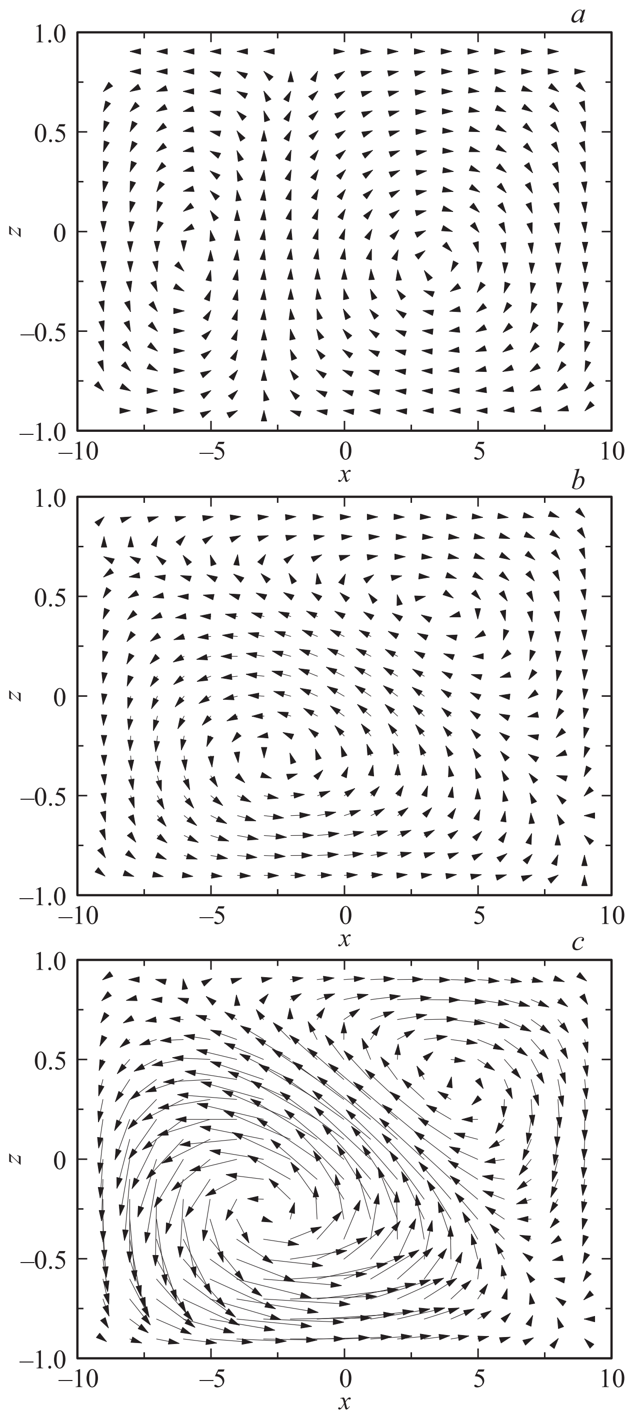

Рис. 4. То же, что на рис. 2, для потока тепла $\mathbf{q}$, направленного под углом $\alpha = 90^\circ$ к нижней границе канала, содержащего ОД.

Здесь мощность и продолжительность лазерной накачки подобрана таким образом, чтобы вариация температуры соответствовала области существования нематической фазы. На всех трех рисунках (рис. 2–4) стрелке длиной в 1 mm соответствует величина вектора скорости, равная $1.8\,\mu$m/s. Вначале рассмотрим случай когда тепловой поток $\mathbf{q}$ направлен под углом $\alpha = 20^\circ$ к нижней границе канала содержащего ориентационный дефект. На временах порядка $\sim 10^{-5}$ ($\sim 18\ \mu s$) распределение поля скорости $\mathbf{v}(x, z, \tau)$ характеризуется зарождением двух вихрей, вращающихся навстречу друг другу (рис. 2, a). При этом, первый, наиболее сильный вихрь располагается вблизи нижней, более теплой границы ГОЖК-канала, занимая при этом практически три четверти объема ЖК-фазы и вращается против часовой стрелки. Второй, более слабый вихрь, располагается вблизи верхней менее прогретой границы ГОЖК-канала и вращается по часовой стрелке (случай Ia). По мере прогревания нижней границы ГОЖК-канала с ОД, на временах порядка $\sim 4 \cdot 10^{-5}$ ($\sim 72\ \mu s$), нижний, более сильный вихрь немного ускоряется, а верхний, более слабый вихрь, немного замедляется, по сравнению со случаем Ia (рис. 2, b). К моменту выключения лазерного излучения, спустя время $\tau = \tau_{\text{in}} \sim 1.6 \cdot 10^{-4}$ (~ 0.29 ms), этот двувихревой гидродинамический поток распадается и окончательно формируется одновихревой поток, направленный против часовой стрелки, с центром вращения в середине ГОЖК-канала (случай I) (рис. 2, c). При этом максимальная величина скорости вращения $\upsilon_{\max}(\text{I}) \sim 0.1$ mm/s достигается вблизи ОД, который разогревается до температуры $\chi_{-L<x<L,z=-1} = 0.991$ (~ 304.5 K). При смене направления потока тепла $\mathbf{q} = q_z\hat{\mathbf{k}} = \mathcal{Q}\sin\alpha\hat{\mathbf{k}}$ через нижнюю границу ГОЖК-канала с ОД, со значения $\alpha = 20^\circ$ на 160°, распределение поля скорости $\mathbf{v}(x, z, \tau)$ характеризуется также зарождением двух вихрей, направленных навстречу друг другу, но при этом меняется направленность вихрей (рис. 3, a). На временах порядка $\sim 10^{-5}$ ($\sim 18\,\mu$s), первый, наиболее сильный вихрь вращается по часовой стрелке, а второй, слабый вихрь — против часовой стрелки. Сильный вихрь, как и в случае I, расположен вблизи более теплой нижней границы ГОЖК-канала, а слабый вихрь, вблизи верхней границы канала (рис. 3, a). Дальнейшая эволюция двувихревого течения в ГОЖК-канале, на временах порядка $\sim 4 \cdot 10^{-5}$ ($\sim 72\,\mu$s), повторяет эволюцию гидродинамического течения характерного для случая I (рис. 3, b), с той особенностью, что спустя время $\tau = \tau_{\text{in}} \sim 1.6 \cdot 10^{-4}$ (~ 0.29 ms), окончательно сформировавшийся одновихревой поток вращается по часовой стрелке, с центром вращения в середине ГОЖК-канала (случай II) (рис. 3, c). При этом максимальная величина скорости вращения $\upsilon_{\max}(\text{II}) \sim 0.1$ mm/s достигается вблизи ОД, который также, как и в случае I, разогревается до температуры $\chi_{-L<x<L,z=-1} = 0.991$ (~ 304.5 K). Эволюция распределения поля скорости $\mathbf{v}(x, z, \tau)$ в микроразмерном ГОЖК-канале под действием потока тепла $\mathbf{q}$ направленного перпендикулярно ($\alpha = 90^\circ$) нижней границе ГОЖК-канала с ОД, отличается от двух вышеописанных сценариев эволюции поля скорости. На временах порядка $\sim 10^{-5}$ ($\sim 18\,\mu$s), распределение поля скорости $\mathbf{v}(x, z, \tau)$ также, как и в случаях I и II, характеризуется зарождением двух вихрей, направленных навстречу друг другу (рис. 4, a). При этом, первый, наиболее крупный вихрь располагается в правой части ГОЖК-канала и вращается по часовой стрелке, занимая при этом практически три четверти объема ЖК-фазы. Второй, более мелкий вихрь, располагается в левой части ГОЖК-канала и вращается против часовой стрелки (рис. 4, a). При этом, скорости вращения этих вихрей практически равны друг другу. По мере прогревания нижней границы ГОЖК-канала с ОД, на временах порядка $\sim 4 \cdot 10^{-5}$ ($\sim 72\,\mu$s), размер мелкого левого вихря начинает расти и занимает большую часть ЖК-объема вблизи нижней более теплой границы ГОЖК-канала (рис. 4, b). Скорость вращения левого, теперь уже более крупного вихря возрастает, в то время как скорость вращения правого вихря практически не меняется. К моменту выключения лазерного излучения, спустя время $\tau = \tau_{\text{in}} \sim 1.6 \cdot 10^{-4}$ ($\sim 0.29\,\mu$s), окончательно формируется гидродинамический поток, характеризующийся двумя вихрями, направленными навстречу друг другу (случай III) (рис. 4, c). При этом максимальная величина скорости вращения $\upsilon_{\max}(\text{III})$ левого, более крупного вихря, направленного по часовой стрелке, примерно в два раза меньше максимальной скорости вращения обоих вихрей $\upsilon_{\max}(\text{I})$ и $\upsilon_{\max}(\text{II})$, соответствующих случаям I и II соответственно.

Основываясь на наших вычислениях, можно сделать вывод, что направление теплового потока $\mathbf{q}$ через нижнюю границу ГОЖК-канала содержащего ОД может кардинальным образом влиять на формирование поля скорости в микроразмерном ГОЖК-объеме с ориентационным дефектом. Под влиянием теплового потока, инициируемого сфокусированным лазерным излучением, в ГОЖК-канале с ОД может формироваться как одно, так и двувихревой поток.

4. Заключение

В предлагаемой работе численными методами, в рамках нелинейного обобщения классической теории Эриксена–Лесли, с учетом баланса энтропии, описаны несколько сценариев формирования вихревых течений в микроразмерном гибридно-ориентированном жидкокристаллическом (ГОЖК) канале с ориентационным дефектом (ОД) под действием сфокусированного лазерного излучения. Учет термомеханических вкладов в выражении для сдвигового напряжения и в уравнении баланса энтропии позволил описать процесс формирования двувихревого потока в ГОЖК-каналах. Было установлено, что под действием потока тепла $\mathbf{q}$ направленного под углом α к нижней границе ГОЖК-канала, содержащего ОД, могут окончательно сформироваться два либо один вихрь, хотя на начальном этапе формирования вихревых потоков всегда зарождаются два вихря, вращающиеся навстречу друг другу.

Исследованные в работе особенности, связанные с реакцией ЖК-материала, инкапсулированного в тонкие и сверхтонкие каналы на локально формирующиеся градиенты температуры, необходимо учитывать при создании сенсоров и датчиков, используемых в биотехнологических приложениях, медицине и биометрических оптических системах.

5. Приложение

Уравнение баланса моментов действующих на единицу объема ЖК-фазы имеет вид

$$\mathbf{T}_{\mathrm{el}} + \mathbf{T}_{\mathrm{vis}} + \mathbf{T}_{\mathrm{tm}} = 0,$$

где $\mathbf{T}_{\mathrm{el}} = \frac{\delta \mathscr{W}_{\mathrm{el}}}{\delta \hat{\mathbf{n}}} \times \hat{\mathbf{n}}$ — упругий, $\mathbf{T}_{\mathrm{vis}} = \frac{\delta \mathscr{R}^{\mathrm{vis}}}{\delta \hat{\mathbf{n}}_t} \times \hat{\mathbf{n}}$ — вязкий и $\mathbf{T}_{\mathrm{tm}} = \frac{\delta \mathscr{R}^{\mathrm{tm}}}{\delta \hat{\mathbf{n}}_t} \times \hat{\mathbf{n}}$ — термомеханический вклады в баланс моментов соответственно. Здесь $\hat{\mathbf{n}}_t \equiv \frac{d\hat{\mathbf{n}}}{dt}$ — материальная производная вектора $\hat{\mathbf{n}} = n_x \hat{\mathbf{i}} + n_z \hat{\mathbf{k}}$.

Уравнение баланса линейных моментов, действующих на единицу объема ЖК-фазы имеет вид

$$\rho \frac{d\mathbf{v}}{dt} = \nabla \cdot \sigma,$$

где $\frac{dv}{dt} = \frac{\partial v}{\partial t} + uv_{,x} + wv_{,z}$, $\sigma = \sigma^{\mathrm{el}} + \sigma^{\mathrm{vis}} + \sigma^{\mathrm{tm}} - \mathscr{P}\mathscr{E}$ — полное выражение для тензора напряжения (ТН), состоящее из упругого $\sigma^{\mathrm{el}} = -\frac{\partial \mathscr{W}_{\mathrm{el}}}{\partial \nabla \hat{\mathbf{n}}} \cdot (\nabla \hat{\mathbf{n}})^T$, вязкого $\sigma^{\mathrm{vis}} = \frac{\delta \mathscr{R}^{\mathrm{vis}}}{\delta \nabla \mathbf{v}}$ и термомеханического $\sigma^{\mathrm{tm}} = \frac{\delta \mathscr{R}^{\mathrm{tm}}}{\delta \nabla \mathbf{v}}$ вкладов в ТН соответственно. Здесь $\mathscr{R} = \mathscr{R}^{\mathrm{vis}} + \mathscr{R}^{\mathrm{tm}} + \mathscr{R}^{\mathrm{th}}$ — полная диссипационная функция Рэлея, $\mathscr{W}_{\mathrm{el}} = \frac{1}{2}\big[K_1(\nabla \cdot \hat{\mathbf{n}})^2 + K_3(\hat{\mathbf{n}} \times \nabla \times \hat{\mathbf{n}})^2\big]$ — плотность упругой энергии, K_1 и K_3 — продольный и поперечный коэффициенты упругости, $\mathscr{P}$ — гидростатическое давление в ЖК-системе, $\mathscr{E}$ — единичный тензор, в то время как

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

— вязкий, а

$$\begin{aligned}
\frac{1}{\xi}\mathscr{R}^{\mathrm{tm}} &= (\hat{\mathbf{n}} \cdot \nabla T)\, \mathbf{D}_s : \mathbf{M} + \nabla T \cdot \mathbf{D}_s \cdot \mathbf{M} \cdot \hat{\mathbf{n}} + (\hat{\mathbf{n}} \cdot \nabla T) \\
&\quad \times (\hat{\mathbf{n}}_t - \mathbf{D}_a \cdot \hat{\mathbf{n}} - 3\mathbf{D}_s \cdot \hat{\mathbf{n}} + 3\,(\hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{D}_s \cdot \hat{\mathbf{n}})\, \hat{\mathbf{n}}) \cdot \mathbf{M} \cdot \hat{\mathbf{n}} \\
&\quad + \hat{\mathbf{n}}(\nabla \mathbf{v})^T \cdot \mathbf{M} \cdot \nabla T + \frac{1}{2}(\hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{D}_s \cdot \hat{\mathbf{n}}) \nabla T \cdot \mathbf{M} \cdot \hat{\mathbf{n}} \\
&\quad + \hat{\mathbf{n}}_t \cdot \mathbf{M} \cdot \nabla T + \frac{1}{2}\mathscr{M}_0 \nabla T \cdot \nabla \mathbf{v} \cdot \hat{\mathbf{n}} \\
&\quad + (\hat{\mathbf{n}} \cdot \nabla T)\, \mathscr{M}_0\, (\hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{D}_s \cdot \hat{\mathbf{n}}) + \frac{1}{2}\mathscr{M}_0 \hat{\mathbf{n}}_t \cdot \nabla T
\end{aligned}$$

и

$$\mathscr{R}^{\mathrm{th}} = \frac{1}{T}\left(\lambda_{\parallel}\,(\hat{\mathbf{n}} \cdot \nabla T)\right)^2 + \lambda_{\perp}\left(\nabla T - \hat{\mathbf{n}}\,(\hat{\mathbf{n}} \cdot \nabla T)^2\right)$$

— термомеханический и термический вклады в полное выражение для функции Рэлея $\mathscr{R}$ соответственно. Здесь $\alpha_1 \div \alpha_6$ — коэффициенты вязкости Лесли, $\gamma_1(T)$ и $\gamma_2(T)$ — коэффициенты вращательной вязкости ЖК-системы, ξ — термомеханическая постоянная, $\lambda_{\parallel}$ и $\lambda_{\perp}$ — коэффициенты теплопроводности ЖК-системы вдоль и поперек направления директора $\hat{\mathbf{n}}$ соответственно. Тензоры $\mathbf{D}_s = \frac{1}{2}\left[\nabla \mathbf{v} + (\nabla \mathbf{v})^T\right]$ и $\mathbf{D}_a = \frac{1}{2}\left[\nabla \mathbf{v} - (\nabla \mathbf{v})^T\right]$ — являются симметричным и асимметричным вкладами в тензор скорости деформации, $\mathbf{M} = \frac{1}{2}\left[\nabla \hat{\mathbf{n}} + (\nabla \hat{\mathbf{n}})^{\mathrm{T}}\right]$ и $\mathscr{M}_0 = \nabla \cdot \hat{\mathbf{n}}$ — скалярный инвариант тензора $\mathbf{M}$.

Уравнение теплопроводности описывающее изменение поля температуры $T(x, z, t)$ под действием потока тепла $\mathbf{q}$ через нижнюю границу ГОЖК-канала имеет вид

$$\rho C_P \frac{dT}{dt} = -\nabla \cdot \mathbf{Q},$$

где $\mathbf{Q} = -T\,\frac{\delta \mathscr{R}}{\delta \nabla T}$ — есть тепловой поток в ЖК-системе, а C_P — коэффициент теплоемкости соответственно.

Список литературы

[1] H.A. Stone, A.D. Stroock, A. Ajdari. Annu. Rev. Fluid Mech. **36**, 381 (2004).
[2] T.M. Squires, S.R. Quake. Rev. Mod. Phys. **77**, 977 (2005).
[3] R.B. Shoch, J.Y. Han, P. Renaud. Rev. Mod. Phys. **80**, 839 (2008).
[4] P. Hanggi, F. Marchesoni. Rev. Mod. Phys. **81**, 387 (2009).
[5] W. Sparreboom, A. van den Berg, J.C.T. Eijkel. New. J. Phys. **12**, 0115004 (2010).
[6] P. Popov, L.W. Hanaker, M. Mirheydari, E.K. Mann, A. Jakli. Sci. Rep. **7**, 1603 (2017).
[7] J. Beekman, I. Nys, O. Willekens, K. Neyts. J. Appl. Phys. **121**, 023106 (2017).
[8] S. Lee, R. An, J.A. Hunt. Nature Nanotech. **5**, 412 (2010).
[9] E. Verneuil, M.L. Cordero, F. Gallaire, Ch.N. Baroud. Langmuir **25**, 5127 (2009).
[10] P.G. de Gennes, J. Prost. The Physics of Liquid Crystals. Oxford Univ. Press, Oxford (1995). 400 p.
[11] A.V. Zakharov, A.A. Vakulenko. J. Chem. Phys. **127**, 084907 (2007).
[12] R.S. Akopyan, R.B. Alaverdian, E.A. Santrosian, Y.S. Chilingarian. J. Appl. Phys. **90**, 3371 (2001).
[13] J.L. Ericksen. Arch. Ration. Mech. Anal. **4**, 231 (1960).
[14] F.M. Leslie. Arch. Ration. Mech. Anal. **28**, 265 (1968).
[15] С. Гроот, П. Мазур. Неравновесная термодинамика. Мир, М. (1964). 456 с.
[16] A.V. Zakharov, P.V. Maslennikov. Phys. Rev. E **96**, 052705 (2017).
[17] И.С. Березин, Н.Р. Жидков. Методы вычислений. Физматгиз, М. (1964). 464 с.
[18] А.А. Самарский, Е.С. Николаев. Методы решения сеточных уравнений. Наука, М. (1978). 592 с.

Редактор Ю.Э. Китаев