

Принцип немеханической транспортировки жидкого кристалла в тонких капиллярах

© А.В. Захаров, А.А. Вакуленко

Институт проблем машиноведения РАН,
Санкт-Петербург, Россия
E-mail: avak2vale@mail.ru

(Поступила в Редакцию 18 января 2011 г.)

Немеханический принцип транспортировки жидкого кристалла (ЖК), инкапсулированного в узкую полость между двумя коаксиально расположенными цилиндрами, вводится на основе взаимодействия градиента температуры и градиента поля директора. Градиент температуры создается за счет потока тепла с поверхности внутреннего цилиндра, в то время как температура на поверхности внешнего цилиндра поддерживается постоянной. Градиент поля директора обусловлен деформацией планарно-ориентированной ЖК-полости под действием двойного электростатического слоя, естественно возникающего на границе раздела ЖК-фаза/твердое тело. Найдены размеры зазора между ограничивающими поверхностями, кривизны цилиндров и тепловой режим, позволяющие инициировать течение ЖК-фазы в горизонтальном направлении.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (проект № 02-09-00010-а).

1. Введение

Наряду с широким использованием жидких кристаллов (ЖК) в производстве ЖК-дисплеев другой не менее интригующей областью применения ЖК является микро- и нанофлюидистика, т. е. наука о движении жидкости в микро- и наноразмерных каналах и капиллярах. В течение последних десяти лет число публикаций, посвященных нанофлюидистике, удваивается почти каждые два года [1]. Эта тенденция, по-видимому, будет только неуклонно усиливаться, поскольку как микро-, так и нанофлюидистика находят широкое применение в аналитической и экспериментальной химии и биохимии, а также в медицинской диагностике и фармакологии [2]. Отдельно следует отметить широкое использование методов микро- и нанофлюидистики при создании новых семейств сенсоров и датчиков на основе термотропных и лиотропных ЖК-систем. Методы микро- и нанофлюидистики также находят применение при исследовании процессов транспортировки и сортировки нанолитровых капель жидкости или ЖК в разветвленных каналах и капиллярах (lab-on-chip-system) под действием внешнего электрического поля (электрокинетика) [3]. Недавно был предложен новый метод транспортировки нанолитровых ЖК-капель, инкапсулированных в узкие (микрометровых размеров) каналы и капилляры под действием градиента температуры, создаваемого за счет разности температур на ограничивающих поверхностях [4–8]. Было показано, что необходимым и достаточным условием возникновения направленного горизонтального потока в гибридно-ориентированном канале или капилляре, в котором ориентация поля директора на одной из ограничивающих поверхностей планарная, а на другой — гомеотропная, является взаимодействие градиентов температуры и поля директора ЖК-фазы. В случае однородно-ориентированной ЖК-фазы, когда

ориентация поля директора на ограничивающих поверхностях либо планарная, либо гомеотропная, направленное течение ЖК-фазы под действием только градиента температуры отсутствует. В этом случае, чтобы инициировать горизонтальное течение ЖК-фазы, необходимо деформировать однородно ориентированную ЖК-среду, с тем чтобы создать градиент поля директора. Этим фактором, который позволит деформировать планарно-ориентированную ЖК-полость (ПОЖК), заключенную между двумя коаксиальными цилиндрами, может служить перпендикулярно направленное электрическое поле. Таким полем является, например, поле двойного электрического слоя, естественно возникающее на границе раздела ЖК/твердое тело. Поскольку ЖК представляет собой слабый электролит, в котором число ионов практически равно числу катионов, в пристенном слое на границе раздела ЖК/твердое тело возникает двойной электрический слой с плотностью заряда σ . Электростатическое поле, создаваемое этим зарядом, пронизывает ЖК-фазу на расстояние порядка длины дебаевской экранировки λ_D [9]. Пусть градиент температуры цилиндрической ЖК-полости, ограниченной двумя коаксиальными, горизонтально расположенными цилиндрами, создается за счет джоулевого разогрева внутреннего цилиндра ($r = R_1$), в то время как внешний цилиндр ($r = R_2$) термически изолирован и на нем поддерживается постоянная температура. При этом возникает вопрос: достаточно ли величины плотности электростатического заряда σ двойного электрического слоя, естественно возникающего на границе раздела ЖК-фаза/твердое тело, для того чтобы осуществить деформацию ЖК-фазы и тем самым инициировать горизонтальный поток ЖК-материала. Следует отметить, что деформация планарно-ориентированной ЖК-полости возможна лишь при значениях электростатического поля [10] $E > E_{th} = \frac{\pi}{d} \sqrt{\frac{K_1}{\varepsilon_0 \varepsilon_a}}$, где E_{th} — величина порогового значения электростатического поля, при котором

начинается деформация поля директора в точке, равноудаленной от границ ЖК-полости, $d = R_2 - R_1$, K_1 — коэффициент продольной деформации Франка, ε_0 — диэлектрическая проницаемость вакуума, $\varepsilon_a = \varepsilon_{\parallel} - \varepsilon_{\perp}$ — анизотропная диэлектрическая постоянная ЖК-среды, ε_{\parallel} и ε_{\perp} — диэлектрические постоянные в направлениях, параллельном и перпендикулярном директору $\hat{\mathbf{n}}$.

Ответ на этот вопрос будет дан в рамках обобщенной нелинейной теории Эриксона–Лесли [11,12] с учетом термомеханического вклада в выражение для сдвигового напряжения и в уравнение баланса энтропии.

2. Основные уравнения

Рассмотрим цилиндрическую полость между двумя горизонтальными, коаксиально расположенными цилиндрами с радиусами R_1 и R_2 ($R_2 > R_1$), заполненную жидким кристаллом. Будем предполагать одинаковую планарную ориентацию директора на ограничивающих цилиндрах (см. рис. 1 в работе [8])

$$\theta_{r=R_1} = \theta_{r=R_2} = 0, \quad (1)$$

где θ — угол между направлением директора $\hat{\mathbf{n}}$ и ортом $\hat{\mathbf{k}}$, а директор $\hat{\mathbf{n}} = n_r \hat{\mathbf{e}}_r + n_z \hat{\mathbf{k}}$ лежит в плоскости (r, z) , образованной ортами $\hat{\mathbf{e}}_r$ и $\hat{\mathbf{k}}$. Это подразумевает, что система координат выбрана так, что директор находится в плоскости, образованной единичным радиус-вектором $\hat{\mathbf{e}}_r$ и единичным вектором, направленным вдоль оси коаксиальных цилиндров $\hat{\mathbf{k}}$, который также совпадает с планарной ориентацией директора на обеих ограничивающих поверхностях ($\hat{\mathbf{k}} \parallel \hat{\mathbf{n}}_{r=R_1}$ и $\hat{\mathbf{k}} \parallel \hat{\mathbf{n}}_{r=R_2}$), в то время как тангенциальный орт $\hat{\mathbf{e}}_{\varphi}$ равен $\hat{\mathbf{e}}_{\varphi} = \hat{\mathbf{k}} \times \hat{\mathbf{e}}_r$ [8].

Принимая во внимание тот факт, что толщина ЖК-полости $d = R_2 - R_1 \sim 100\text{--}200$ nm и $d \ll l$, где l — длина коаксиальных цилиндров, можем предположить, что все физические величины, которые будут вовлечены в описание гидродинамических процессов, протекающих в планарно-ориентированной ЖК-полости, зависят только от времени t и радиуса r . Таким образом, выражение для директора принимает вид $\hat{\mathbf{n}} = \sin \theta(t, r) \hat{\mathbf{e}}_r + \cos \theta(t, r) \hat{\mathbf{k}}$.

Будем предполагать, что внутренняя поверхность цилиндра ($r = R_1$) разогрета, например, посредством пропускания электрического тока по внутреннему цилиндру (джоулев разогрев), а внешняя поверхность цилиндра ($r = R_2$) термически изолирована и на ней поддерживается постоянная температура T_{out} . Это предполагает, что через внутреннюю поверхность цилиндра ($r = R_1$) в ЖК-фазу поступает однородный поток тепла \mathbf{q}_{in} , а граничное условие на внутреннем цилиндре принимает вид

$$\lambda_{\perp} \left(\frac{\partial T}{\partial r} \right)_{r=R_1} = -q_{\text{in}}, \quad (2)$$

в то время как на внешнем цилиндре граничное условие для поля температуры имеет вид

$$T_{r=R_2} = T_{\text{out}}. \quad (3)$$

Здесь λ_{\perp} — коэффициент теплопроводности в направлении, перпендикулярном направлению директора $\hat{\mathbf{n}}$.

Отметим, что ЖК-фаза обычно содержит практически равное количество ионов и катионов (слабый электролит) и, находясь в контакте с твердой ограничивающей поверхностью на границе раздела ЖК-фаза/твердое тело, образует двойной электрический слой с плотностью электрического заряда σ . Электростатическое поле \mathbf{E} , инициированное этим двойным слоем, будет проникать в объем ЖК-фазы на глубину порядка дебаевской длины экранировки $\lambda_D = \sqrt{\frac{\bar{\varepsilon} \varepsilon_0 k_B T}{2e^2 n_{\text{eq}}}}$ [9] и может быть рассчитано в рамках теории Пуассона–Больцмана [9] как

$$\mathbf{E}(r) = E_0 \mathcal{E}(r) \hat{\mathbf{e}}_r = E_0 \left[C_I \mathcal{X}_1 \left(\frac{r}{\lambda_D} \right) - C_K \mathcal{L}_1 \left(\frac{r}{\lambda_D} \right) \right] \hat{\mathbf{e}}_r, \quad (4)$$

где $E_0 = \sigma / \varepsilon_0 \varepsilon$ — поверхностное электростатическое поле, $\varepsilon = (\varepsilon_{\parallel} \cos^2 \theta_s + \varepsilon_{\perp} \sin^2 \theta_s)$ — диэлектрическая проницаемость ЖК-фазы на границе раздела ЖК-фаза/твердое тело, $\bar{\varepsilon} = (2\varepsilon_{\perp} + 2\varepsilon_{\parallel})/3$ — изотропная диэлектрическая постоянная, e — заряд протона, k_B — постоянная Больцмана, T — температура ЖК-фазы, n_{eq} — концентрация ионов в объеме ЖК-фазы, а θ_s — значение угла между направлением директора $\hat{\mathbf{n}}$ и орта $\hat{\mathbf{k}}$ на ограничивающих поверхностях. Здесь векторная функция $\mathbf{E}(r)$ равна $\mathbf{E}(r) = -\nabla \varphi$, где потенциал φ удовлетворяет уравнению Пуассона $\Delta \varphi - \lambda_D^{-2} \varphi = 0$ с граничными условиями на внутреннем $\nabla \varphi_{r=R_1} = -E_0 \hat{\mathbf{e}}_r$ и внешнем $\nabla \varphi_{r=R_2} = E_0 \hat{\mathbf{e}}_r$ цилиндрах. Окончательное выражение для функции $\mathcal{E}(r)$ принимает вид $\mathcal{E}(r) = C_I \mathcal{X}_1 \left(\frac{r}{\lambda_D} \right) - C_K \mathcal{L}_1 \left(\frac{r}{\lambda_D} \right)$, где $C_I = \frac{\mathcal{L}_1 \left(\frac{R_1}{\lambda_D} \right) + \mathcal{L}_1 \left(\frac{R_2}{\lambda_D} \right)}{\Delta}$, $C_K = \frac{\mathcal{X}_1 \left(\frac{R_1}{\lambda_D} \right) + \mathcal{X}_1 \left(\frac{R_2}{\lambda_D} \right)}{\Delta}$, $\Delta = \mathcal{L}_1 \left(\frac{R_2}{\lambda_D} \right) \mathcal{X}_1 \left(\frac{R_1}{\lambda_D} \right) - \mathcal{L}_1 \left(\frac{R_1}{\lambda_D} \right) \mathcal{X}_1 \left(\frac{R_2}{\lambda_D} \right)$; \mathcal{L}_1 и \mathcal{X}_1 — модифицированные функции Бесселя первого порядка и второго рода соответственно.

Принимая во внимание прилипание на ограничивающих цилиндрах, граничное условие для поля скорости можно записать в виде

$$\mathbf{v}(\mathbf{r})_{r=R_1} = \mathbf{v}(\mathbf{r})_{r=R_2} = 0. \quad (5)$$

Учитывая малую толщину ЖК-полости, мы также можем предположить, что плотность ЖК-фазы мало изменится вдоль радиуса r и условие несжимаемости может быть записано в виде $\nabla \cdot \mathbf{v} = 0$. Последнее условие, рассмотренное совместно с условием прилипания (5), приводит к тому, что в рамках нашей модели существует только одна компонента поля скорости \mathbf{v} , направленная параллельно ограничивающим цилиндрам, т. е. $\mathbf{v}(t, r) = v_z(t, r) \hat{\mathbf{k}} \equiv u(t, r) \hat{\mathbf{k}}$.

Гидродинамические уравнения, описывающие процесс переориентировки ПОЖК, состоят из уравнения баланса моментов, действующих на единицу объема ЖК-фазы, уравнения Навье–Стокса для поля скорости, возбужденного потоком тепла \mathbf{q} , и уравнения баланса энтропии. Баланс моментов образован упругим $\mathbf{T}_{\text{elast}}$, вязким \mathbf{T}_{vis} , термомеханическим \mathbf{T}_{im} и электрическим \mathbf{T}_{el}

вкладами и имеет вид $\mathbf{T}_{\text{elast}} + \mathbf{T}_{\text{vis}} + \mathbf{T}_{\text{tm}} + \mathbf{T}_{\text{cl}} = 0$. Здесь $\mathbf{T}_{\text{elast}} = (\delta W_{\text{elast}}/\delta \hat{\mathbf{n}}) \times \hat{\mathbf{n}}$, $\mathbf{T}_{\text{vis}} = (\delta \mathcal{R}_{\text{vis}}/\delta \hat{\mathbf{n}}) \times \hat{\mathbf{n}}$, $\mathbf{T}_{\text{tm}} = (\delta \mathcal{R}_{\text{tm}}/\delta \hat{\mathbf{n}}) \times \hat{\mathbf{n}}$ и $\mathbf{T}_{\text{cl}} = -\varepsilon_0 \varepsilon_a \mathbf{E} \times \hat{\mathbf{n}}(\mathbf{E} \cdot \hat{\mathbf{n}})$, где $\hat{\mathbf{n}} = \frac{d\mathbf{n}}{dt} = \frac{\partial \mathbf{n}}{\partial t} \equiv \dot{\mathbf{n}}$, — материальная производная директора, а $\mathbf{q} = -T(\partial \mathcal{R}/\partial \nabla T)$ — поток тепла в объеме ЖК-полости. $W_{\text{elast}} = \frac{1}{2} [K_1(\nabla \cdot \hat{\mathbf{n}})^2 + K_3(\hat{\mathbf{n}} \times \nabla \times \hat{\mathbf{n}})^2] = \frac{1}{2} [K_1(\cos \theta \theta_r + \frac{\sin \theta}{r})^2 + K_3 \sin^2 \theta \theta_r^2]$ обозначает плотность упругой энергии, K_1 и K_3 — упругие коэффициенты продольного и поперечного изгиба, $\mathcal{R} = \mathcal{R}_{\text{vis}} + \mathcal{R}_{\text{tm}} + \mathcal{R}_{\text{th}}$ — полная диссипационная функция Рэлея, где $\mathcal{R}_{\text{vis}} = \frac{1}{2} [\bar{h}(\theta) u_r^2 - 2\bar{\mathcal{A}}(\theta) \theta_r u_r + \gamma_1 \theta_r^2]$ — вязкий, $\mathcal{R}_{\text{tm}} = \xi T_r [\theta_r (\frac{1}{2} + \cos^2 \theta) + \frac{3 \sin 2\theta}{4r}] - u_r \sin \theta \cos \theta (\theta_r (1 + \frac{1}{4} \sin \theta) + \frac{3}{2r})]$ — термомеханический, $\mathcal{R}_{\text{th}} = \frac{1}{2T} [\lambda_{\parallel} (\hat{\mathbf{n}} \cdot \nabla T)^2 + \lambda_{\perp} (\nabla T - \hat{\mathbf{n}}(\hat{\mathbf{n}} \cdot \nabla T))^2] = \frac{1}{2T} (\lambda_{\parallel} \sin^2 \theta + \lambda_{\perp} \cos^2 \theta) T_r^2$ — термический вклады в диссипационную функцию. Функции $\bar{h}(\theta) = \frac{1}{4} (2\alpha_4 + \gamma_1 + \alpha_5 + \alpha_6) + \alpha_1 \sin^2 \theta \cos^2 \theta + \frac{1}{2} \gamma_2 \cos 2\theta$ и $\bar{\mathcal{A}}(\theta) = -\frac{1}{2} (\gamma_1 + \gamma_2 \cos 2\theta)$ являются гидродинамическими функциями, $u_r = \partial u(t, r)/\partial r$, $\theta_r = \partial \theta(t, r)/\partial t$, $\xi \sim 10^{-12}$ [J/mK] — термомеханическая постоянная [13], $\alpha_1(T) - \alpha_6(T)$ — шесть коэффициентов вязкости Лесли, зависящих от температуры, $\gamma_1(T)$ и $\gamma_2(T)$ — коэффициенты вращательной вязкости (КВВ), также зависящие от температуры, а λ_{\parallel} — коэффициент теплопроводности вдоль направления директора $\hat{\mathbf{n}}$.

Детали расчета термомеханического вклада в полное выражение энтропии представлены в приложении к работе [4]. Таким образом, безразмерное уравнение баланса моментов принимает вид [8]

$$\begin{aligned} \gamma_1(\chi) \theta_r = & \mathcal{A}(\theta) u_{\bar{r}} + \delta_1 \left[(\mathcal{G}(\theta) \theta_{\bar{r}})_{\bar{r}} - \frac{1}{2} \mathcal{G}(\theta) \theta_{\bar{r}}^2 \right. \\ & \left. + \frac{g(\theta) \theta_{\bar{r}}}{\bar{r}} - \frac{1}{2} \left(\frac{K_1(\chi)}{K_{10} \bar{r}} \right)_{\bar{r}} \sin 2\theta \right] - \delta_2 \chi_{\bar{r}} \\ & \times \left[\theta_{\bar{r}} \left(\frac{1}{2} + \cos^2 \theta \right) + \frac{3}{4\bar{r}} \sin 2\theta \right] + \frac{1}{2} \mathcal{G}^2(\bar{r}) \sin 2\theta, \end{aligned} \quad (6)$$

где $\gamma_1(\chi) = \gamma_1(\chi)/\gamma_{10}$, γ_{10} и K_{10} — наибольшие значения КВВ $\gamma_1(\chi)$ и упругого коэффициента $K_1(\chi)$ в температурном интервале, соответствующем стабильной нематической фазе, $[\chi_{\text{out}}, \chi_{\text{in}}]$, $\chi(\tau, \bar{r}) = T(\tau, \bar{r})/T_{NI}$ — безразмерная температура, $\tau = (\frac{\varepsilon_0 \varepsilon_a E_0^2}{\gamma_{10}}) t$ — безразмерное время, $\bar{r} = r/(R_2 - R_1)$ — безразмерный полярный радиус, $\mathcal{A}(\theta) = \bar{\mathcal{A}}(\theta)/\gamma_{10}$, и $\mathcal{G}(\theta) = \frac{1}{K_{10}} \times (K_1(\chi) \cos^2 \theta + K_3(\chi) \sin^2 \theta)$ — безразмерные гидродинамическая и упругая функции, а $\delta_1 = (\frac{E_{\text{th}}}{\pi E_0})^2$ и $\delta_2 = \delta_1 \xi \frac{T_{NI}}{K_{10}}$ являются параметрами системы. Далее черта над переменной r опущена.

В случае несжимаемой ЖК-системы безразмерное уравнение Навье–Стокса принимает вид [8]

$$\delta_3 u_r(\tau, r) = \nabla_r \sigma_{rz,r}, \quad (7)$$

$$\mathcal{P}_r(\tau, r) + \frac{\delta \mathcal{R}}{\delta \theta_r} \theta_r = 0, \quad (8)$$

где $\sigma_{rz} = \frac{\delta \mathcal{R}}{\delta u_r} = h(\theta) u_r - \mathcal{A}(\theta) \theta_r - \frac{1}{2} \delta_2 \chi_r \sin 2\theta \times [\theta_r (1 + \frac{1}{4} \sin \theta) + \frac{3}{2r}]$ — сдвиговая компонента тензора напряжений, $h(\theta) = \bar{h}(\theta)/\gamma_{10}$, \mathcal{P} — безразмерное давление, а $\delta_3 = \rho \frac{K_{10}}{\gamma_{10}^2} (\frac{\pi E_0}{E_{\text{th}}})^2$ — дополнительный параметр системы. В случае малого перепада температуры $\chi(\tau, r)$ по сечению ЖК-полости безразмерное уравнение баланса энтропии принимает вид [8]

$$\begin{aligned} \delta_4 \chi_r(\tau, r) = & [\chi_r (\lambda \sin^2 \theta + \cos^2 \theta)]_r \\ & + \delta_5 \left[\chi \left\{ \theta_r \left(\theta_r \left(\frac{1}{2} + \cos^2 \theta \right) + \frac{3 \sin 2\theta}{4r} \right) \right. \right. \\ & \left. \left. - \frac{1}{2} u_r \sin 2\theta \left(\theta_r \left(1 + \frac{1}{4} \sin \theta \right) + \frac{3}{2r} \right) \right\} \right]_r, \end{aligned} \quad (9)$$

где $\delta_3 = \rho \frac{C_p d^2 \varepsilon_0 \varepsilon_a E_0^2}{\gamma_{10} \lambda_{\perp}}$ и $\delta_4 = \xi \frac{\varepsilon_0 \varepsilon_a E_0^2}{\gamma_{10} \lambda_{\perp}}$ — два дополнительных параметра системы, $\lambda = \lambda_{\parallel}/\lambda_{\perp}$, а C_p — коэффициент теплоемкости ЖК-фазы. Таким образом, множество параметров, входящих в уравнения (6), (7) и (9), имеют вид

$$\begin{aligned} \delta_1 = & \left(\frac{E_{\text{th}}}{\pi E_0} \right)^2, \quad \delta_2 = \delta_1 \xi \frac{T_{NI}}{K_{10}}, \quad \delta_3 = \rho \frac{K_{10}}{\gamma_{10}^2} \left(\frac{\pi E_0}{E_{\text{th}}} \right)^2, \\ \delta_4 = & \rho \frac{C_p d^2 \varepsilon_0 \varepsilon_a E_0^2}{\gamma_{10} \lambda_{\perp}}, \quad \delta_5 = \xi \frac{\varepsilon_0 \varepsilon_a E_0^2}{\gamma_{10} \lambda_{\perp}}. \end{aligned}$$

В безразмерных единицах упомянутое выше граничное условие (уравнение (1)) для директора $\hat{\mathbf{n}}$ принимает вид

$$\theta_{r=a} = \theta_{r=a+1} = 0, \quad (10)$$

а граничные условия для поля скорости (уравнение (5)) и температуры (уравнения (2), (3)) могут быть записаны в виде

$$u(r)_{r=a} = u(r)_{r=a+1} = 0, \quad (11)$$

$$\left(\frac{\partial \chi(\tau, r)}{\partial r} \right)_{r=a} = -Q, \quad \chi_{r=a+1} = \chi_{\text{out}}. \quad (12)$$

Здесь $Q = \frac{q_{\text{in}} d}{T_{NI} \lambda_{\perp}}$ — безразмерный поток тепла с внутреннего ограничивающего цилиндра в ЖК-полость, $a = R_1/d$ и $a + 1$ соответствуют безразмерным значениям внутреннего и внешнего радиусов ограничивающих цилиндров.

Для 4-*n*-пентил-4'-цианофенила (5ЦБ) при температуре $T_{\text{out}} = 300$ К и плотности 10^3 kg/m³ экспериментальные значения для упругих коэффициентов составляют $K_{10} = 10.5$ pN и $K_{30} = 13.8$ pN [14], в то время как значения диэлектрических коэффициентов равны $\varepsilon_{\parallel} = 18$ и $\varepsilon_{\perp} = 8$ [15], а значения коэффициентов вращательной вязкости оцениваются $\gamma_{10} \sim 0.072$ Pa · s и $\gamma_{20} \sim -0.079$ Pa · s соответственно [16]. При температуре 300 К и плотности 10^3 kg/m³ значения шести коэффициентов Лесли [в Pa · s] были определены в

работе [16]: $\alpha_1 \sim 0.0066$, $\alpha_2 \sim -0.075$, $\alpha_3 \sim -0.0035$, $\alpha_4 \sim 0.072$, $\alpha_5 \sim 0.048$ и $\alpha_6 \sim -0.03$ соответственно. Значение плотности заряда было выбрано равным $\sigma = 4 \cdot 10^{-3} \text{ C/m}^2$. Поскольку поверхностная плотность заряда равна $\sigma = n_{\text{surf}} e$, значению $\sigma = 4 \cdot 10^{-3} \text{ C/m}^2$ соответствует поверхностная плотность заряда, равная $n_{\text{surf}} \sim 2 \cdot 10^{16} \text{ m}^{-2}$, что близко к экспериментальным значениям $n_{\text{surf}} \sim 10^{15} - 10^{16} \text{ m}^{-2}$ [9]. Значение коэффициента теплопроводности λ_{\perp} было выбрано равным $0.13 \text{ W/m} \cdot \text{K}$ [17], а величины C_p — $10^{13} \text{ J/kg} \cdot \text{K}$ [18]. Величина дебаевской длины зависит только от физических свойств ЖК-фазы и не зависит от свойств поверхности. В нашем случае дебаевская длина оценивается как $\lambda_D \sim 50 \text{ nm}$. Величины параметров, входящих в уравнения (6), (7) и (9), имеют следующие значения: $\delta_1 \sim 2.5 \cdot 10^{-3}$, $\delta_2 \sim 0.07$, $\delta_3 \sim 0.9 \cdot 10^{-3}$, $\delta_4 \sim 0.47$ и $\delta_5 \sim 1.15 \cdot 10^{-6}$. Используя тот факт, что $\delta_4 \ll 1$, уравнение Навье–Стокса (7) можно существенно упростить:

$$\sigma_{rz} = h(\theta)u_r - \mathcal{A}(\theta)\theta_r - \delta_2\chi_r \sin\theta \cos\theta \times \left[\theta_r \left(1 + \frac{1}{4} \sin^2\theta \right) + \frac{3}{2r} \right] = \frac{C(\tau)}{r}, \quad (13)$$

где $C(\tau)$ определяется граничным условием (11). С учетом того, что $\delta_5 \ll 1$, уравнение (9) принимает вид

$$\delta_5\chi_r(\tau, r) = [\chi_r(\lambda \sin^2\theta + \cos^2\theta)]_r. \quad (14)$$

3. Ориентационная релаксация директора, температуры и скорости в ПОЖК

Процесс релаксации поля директора $\hat{\mathbf{n}}(\tau, r)$, определяемого углом $\theta(\tau, r)$, скорости $u(\tau, r)$ и температуры $\chi(\tau, r)$ описывается системой нелинейных уравнений в частных производных (6), (13) и (14) совместно с граничными условиями (10)–(12) и начальным условием $\theta(\tau = 0, r) = \theta_{\text{eq}}(r)$ ($a \leq r \leq a + 1$). В расчетах были выбраны следующие величины: толщина ЖК-полости $d = 4.0\lambda_D$ ($\sim 0.2 \mu\text{m}$), безразмерный тепловой поток $Q = 0.04$ ($\sim 8.0 \mu\text{W}/\mu\text{m}^2$), плотность поверхностного заряда $\sigma = 4 \cdot 10^{-3} \text{ C/m}^2$. Вычисления были проведены для двух выбранных значений радиуса внутреннего цилиндра: $a = 0.25$ (вариант I) и $a = 2.0$ (вариант II).

На рис. 1 представлено распределение электростатического поля $E(r)/E_{\text{th}}$ по сечению ЖК-полости, обусловленное поверхностной плотностью заряда σ на обеих ограничивающих поверхностях и рассчитанное с помощью уравнения (4) для значений $a = 0.25$ (кривая 1) и 2.0 (кривая 2). На рис. 2 представлены результаты расчета распределения равновесного угла $\theta_{\text{eq}}(r)$ по сечению ЖК-полости, рассчитанные с помощью системы нелинейных уравнений (6), (13) и (14) совместно с граничными условиями (10)–(12) для вариантов I и II (кривые 1 и 2 соответственно). При фиксированном размере зазора между двумя

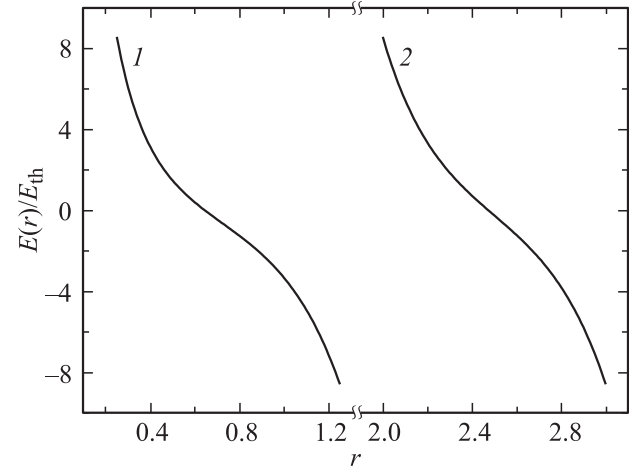


Рис. 1. Распределение электростатического поля по сечению ПОЖК-полости для двух геометрий. 1, 2 — варианты I и II соответственно.

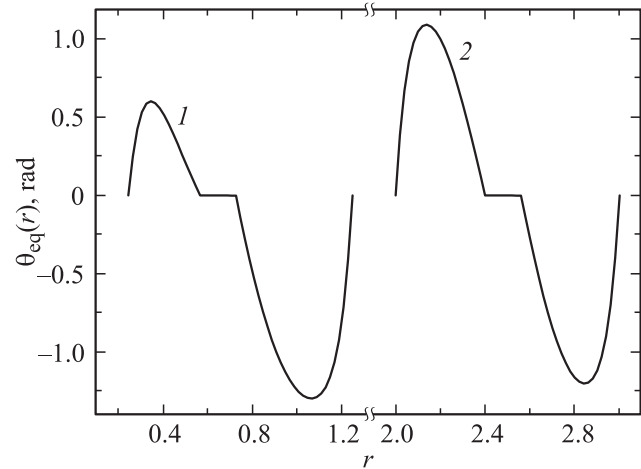


Рис. 2. Распределение равновесного угла $\theta_{\text{eq}}(r)$ по сечению ПОЖК-полости для двух геометрий. 1, 2 — варианты I и II соответственно.

цилиндрами $d = 4\lambda_D$ влияние электростатического поля ограничивается приповерхностными областями $0 \leq r \leq 0.55$ и $0.75 \leq r \leq 1.0$ (в варианте I) и $2.0 \leq r \leq 2.4$ и $2.55 \leq r \leq 3.0$ (в варианте II). Таким образом, внутренняя часть ЖК-полости остается недеформированной, т.е. планарно-ориентированной (рис. 2). Эволюция как поля температуры $\chi(\tau, r)$, так и поля скорости $u(\tau, r)$ по сечению ЖК-полости в процессе нагревания внутреннего цилиндра, когда в объем ЖК-материала направлен поток тепла $Q = 0.04$ ($\sim 8.0 \mu\text{W}/\mu\text{m}^2$) с поверхности внутреннего цилиндра, а на поверхности внешнего цилиндра поддерживается постоянная температура $\chi_{r=a+1} = \chi_{\text{out}}$, была рассчитана с помощью системы нелинейных уравнений (6), (13) и (14) совместно с граничными условиями (10)–(12) и начальным условием $\theta(\tau = 0, r) = \theta_{\text{eq}}(r)$, ($a \leq r \leq a + 1$) методом численной релаксации [19]. Критерием

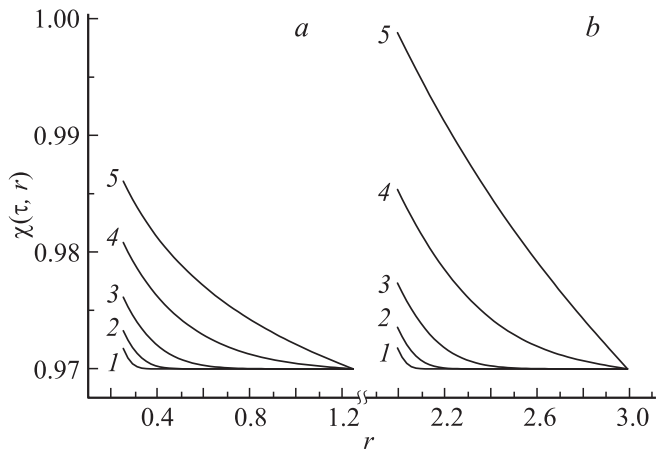


Рис. 3. Релаксация поля температуры $\chi(\tau, r)$ по сечению ПОЖК-полости в режиме нагрева в различные моменты времени для вариантов I (a) и II (b): 1 — $\tau_1 = 0.0008$, 2 — $\tau_2 = 0.004$, 3 — $\tau_3 = 0.02$, 4 — $\tau_4 = 0.1$, 5 — $\tau_5 = \tau_h = 0.5$ ($\sim 0.2 \mu s$).

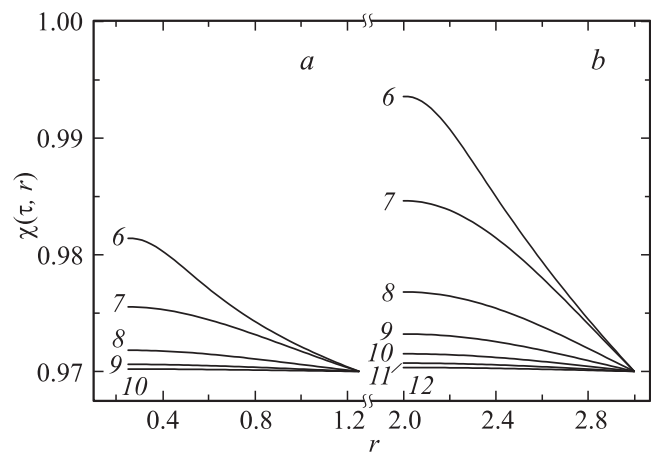


Рис. 4. То же, что на рис. 3, в моменты времени, соответствующие режиму охлаждения, для вариантов I (a) и II (b): 6 — $\tau_6 = 0.51$, 7 — $\tau_7 = 0.6$, 8 — $\tau_8 = 0.8$, 9 — $\tau_9 = 1.0$, 10 — $\tau_{10} = 1.2$, 11 — $\tau_{11} = 1.4$, 12 — $\tau_{12} = 1.6$ ($\sim 0.64 \mu s$).

сходимости рашения этой системы был выбран параметр $\varepsilon = |(\theta_{(m+1)}(\tau, r) - \theta_{(m)}(\tau, r)) / \theta_{(m)}(\tau, r)|$, равный 10^{-4} . Здесь m — число итераций. Эволюция поля температуры $\chi(\tau, r)$ по сечению ПОЖК-полости в процессе нагрева внутреннего цилиндра $\tau = \tau_h = \tau_5$ (τ_h — время нагрева) в различные моменты времени представлена на рис. 3 для вариантов геометрии ЖК-ячейки I (a) и II (b). В случае менее искривленной геометрии ограничивающих поверхностей (вариант II) внутренняя поверхность ограничивающего цилиндра разогрелась сильнее (~ 306.5 K), чем в случае более искривленной геометрии (вариант I) (~ 302.6 K). После прекращения разогрева внутреннего цилиндра начался процесс охлаждения ЖК-материала, и для варианта I равномерное распределение поля температуры по сечению ЖК-полости, соответствующее

значению $\chi(\tau_R) = 0.97$ (~ 300 K), установилось спустя время $\tau_R(I) = \tau_{10} = 1.2$ ($\sim 0.48 \mu s$), в то время как для варианта II процесс остывания занял время $\tau_R(II) = \tau_{12} = 1.6$ ($\sim 0.64 \mu s$), что на 0.4 ($\sim 0.16 \mu s$) больше, чем для варианта I (рис. 4). Эволюция поля скорости $u(\tau, r)$ по сечению ПОЖК-полости в процессе нагрева внутреннего цилиндра $\tau = \tau_h = \tau_5$ в те же моменты времени, что и для случая поля температуры (рис. 4), представлена на рис. 5. Для варианта I (более искривленная геометрия) эволюция поля скорости характеризуется тем, что в течение первого промежутка времени, ограниченного $\tau_4 = 0.1$ ($\sim 0.04 \mu s$), поток ЖК-материала формируется в отрицательном направлении только вблизи теплового внутреннего цилиндра. И только спустя время $\tau_5 = \tau_h = 0.5$ ($\sim 0.2 \mu s$) в движение

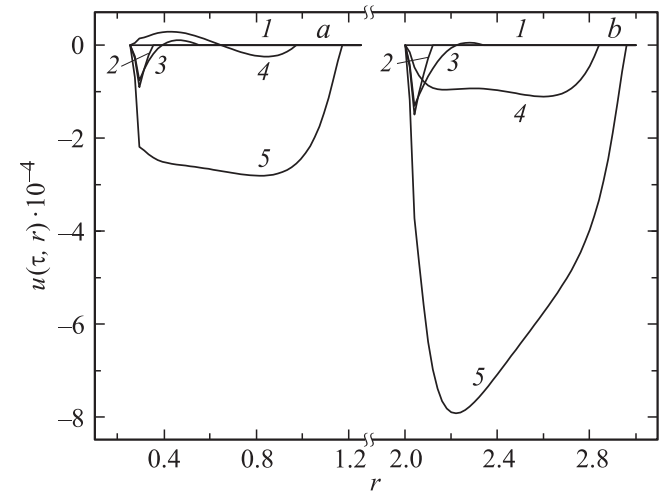


Рис. 5. Релаксация поля скорости $u(\tau, r)$ по сечению ПОЖК-полости в различные моменты времени (режим нагрева) для вариантов I (a) и II (b). Обозначение кривых то же, что на рис. 3.

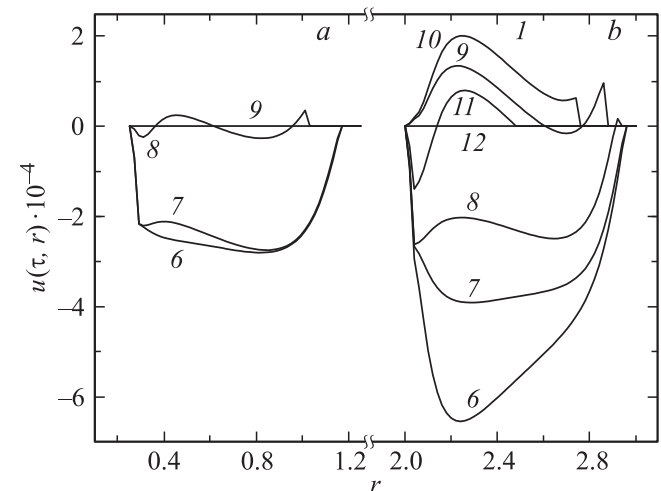


Рис. 6. То же, что на рис. 5, в режиме охлаждения для последовательности времен, соответствующей рис. 4.

приходит остальная часть ЖК-материала, и таким образом практически весь объем ЖК-материала движется в отрицательном направлении. При этом $u_{\max}(\tau = \tau_h, r = 0.83) = 0.0003$ ($\sim 50 \text{ nm}/\mu\text{s}$). Для варианта II (менее искривленная геометрия) эволюция поля скорости, так же как и для варианта I, характеризуется ростом величины $u(\tau, r)$ в отрицательном направлении вблизи теплого внутреннего цилиндра, и только спустя время $\tau = \tau_4 = 0.1$ ($\sim 0.04 \mu\text{s}$) в движение приходит остальная часть ЖК-материала. Ко времени $\tau_5 = \tau_h = 0.5$ ($\sim 0.2 \mu\text{s}$) движение ЖК-материала достигает максимального значения $u_{\max}(\tau = \tau_h, r = 2.2) = 0.0008$ ($\sim 128 \text{ nm}/\mu\text{s}$), что практически в 2.5 раза быстрее, чем для варианта I. После того как процесс нагревания внутреннего цилиндра прекратился (спустя время $\tau_h = 0.5$ ($\sim 0.2 \mu\text{s}$)) движение ЖК-материала в отрицательном направлении стало замедляться, эволюция поля скорости в процессе охлаждения по сечению ЖК-полости представлена на рис. 6 для обоих вариантов геометрии ЖК-ячеек: I (a) и II (b). Для первого варианта геометрии ЖК-ячейки (I) движение ЖК-материала прекратилось спустя время $\tau_R(I) = \tau_9 = 1.0$ ($\sim 0.4 \mu\text{s}$), в то время как для варианта II это движение прекратилось на 0.6 ($\sim 0.24 \mu\text{s}$) позже, чем для варианта I, и составило $\tau_R(II) = \tau_{12} = 1.6$ ($\sim 0.64 \mu\text{s}$).

Таким образом, мы можем сделать заключение, что геометрия капилляра оказывает сильное влияние на формирование поля скорости в однородно-ориентированном ЖК-материале, инкапсулированном между двумя коаксиально расположенными цилиндрами и подверженном воздействию как градиента температуры, так и влиянию электростатического поля, возникающего естественным образом на границе раздела ЖК-фаза/твердое тело.

Следует отметить, что если увеличить тепловой поток в 10 раз, т.е. с $Q = 0.04$ ($\sim 8.0 \mu\text{W}/\mu\text{m}^2$) до 0.4 ($\sim 80.0 \mu\text{W}/\mu\text{m}^2$), то время разогрева ЖК-материала значительно сокращается и это ведет к полному разрушению профиля горизонтальной скорости. В этом случае скорость ЖК-материала резко возрастает только вблизи нагретого внутреннего цилиндра, в то время как остальной объем ЖК-материала остается неподвижным. Так как в этом случае температура на внутреннем цилиндре резко возрастает и достигает критического значения, за которым происходит фазовый переход: нематик—изотропное состояние, дальнейшее нагревание не имеет смысла, а за это время в движение обращается только незначительная часть ЖК-материала, находящаяся вблизи внутреннего теплого цилиндра.

4. Заключение

В предлагаемой работе представлено исследование эволюции поля температуры $T(t, r)$ и скорости $v(t, r)$ по сечению однородно-ориентированной ЖК-полости, заключенной между двумя горизонтально расположенными коаксиальными цилиндрами. Эволюция полей возникает под действием теплового потока, направленного

от внутреннего цилиндра в ЖК-фазу, в то время как температура на внешнем цилиндре была постоянной, и под действием радиально направленного электростатического поля, возникающего естественным образом на границе раздела ЖК-фаза/твердое тело. Нелинейное обобщение классической теории Эриксона–Лесли, допускающее учет термомеханических вкладов в выражение для сдвигового напряжения и в уравнение баланса энтропии, позволило описать процесс формирования и дальнейшую эволюцию не только профиля температуры, но и профиля скорости по сечению ЖК-полости. Было показано, что на величину горизонтальной составляющей скорости ЖК-материала влияют величина потока тепла со стороны внутреннего цилиндра и геометрия ограничивающих ЖК-фазу цилиндров. Умеренное ($Q \sim 8 \mu\text{W}/\mu\text{m}^2$) количество тепла, направленное изнутри в ПОЖК-полость, в сочетании с оценками длительности потоков и геометрии ограничивающих поверхностей способно осуществить одноразовую транспортировку ЖК-материала на расстояние $v_x t \sim 40\text{--}50 \text{ nm}$.

Таким образом, настоящее исследование указывает на возможный способ транспортировки ЖК-материала, инкапсулированного в узкую полость между двумя коаксиальными цилиндрами, что несомненно может быть использовано при создании новых семейств датчиков и сенсоров.

Список литературы

- [1] R.B. Schoch, J.Y. Han, P. Renaud. *Rev. Mod. Phys.* **80**, 839 (2008).
- [2] D. Mijatovic, J.C.T. Eijkel, A. van den Berg. *Lab. Chip.* **5**, 492 (2005).
- [3] W. Sparreboom, A. van den Berg, J.C.T. Eijkel. *New J. Phys.* **12**, 0115 004 (2010).
- [4] A.V. Zakharov, A.A. Vakulenko. *J. Chem. Phys.* **127**, 084 907 (2007).
- [5] A.V. Zakharov, A.A. Vakulenko. *Phys. Rev. E* **80**, 031 708 (2009).
- [6] A.V. Zakharov, A.A. Vakulenko, S. Romano. *J. Chem. Phys.* **131**, 164 902 (2009).
- [7] A.V. Zakharov, A.A. Vakulenko, M. Iwamoto. *J. Chem. Phys.* **132**, 224 906 (2010).
- [8] А.В. Захаров, А.А. Вакуленко. *ФТТ* **52**, 1438 (2010).
- [9] J.N. Israelachvili. *Intermolecular and surface forces*. Academic Press, London (1992). 450 p.
- [10] П. Де Жен. *Физика жидких кристаллов*. Мир, М. (1977). 400 с.
- [11] J.L. Ericksen. *Arch. Ration. Mech. Anal.* **4**, 231 (1960).
- [12] F.M. Leslie. *Arch. Ration. Mech. Anal.* **28**, 265 (1968).
- [13] P.C. Акопян, Б.Я. Зельдович. *ЖЭТФ* **87**, 1660 (1984).
- [14] N.V. Madhusudana, R.B. Ratibha. *Mol. Cryst. Liq. Cryst.* **89**, 249 (1982).
- [15] J. Jadzyn, S. Czerkas, G. Czechowski, A. Burczyk, R. Dabrowski. *Liq. Cryst.* **26**, 437 (1999).
- [16] A.G. Chmielewski. *Mol. Chyst. Liq. Cryst.* **132**, 339 (1986).
- [17] M. Marinelli, A.K. Ghosh, F. Mercuri. *Phys. Rev. E* **63**, 061 713 (2001).
- [18] P. Jamee, G. Pitsi, J. Thoen. *Phys. Rev. E* **66**, 021 707 (2002).
- [19] И.С. Березин, Н.Р. Жидков. *Методы вычислений*. Физматгиз, М. (1964). 464 с.