

# Влияние температурных полей на ориентационную релаксацию в гибридных жидкокристаллических ячейках

© А.В. Захаров, А.А. Вакуленко

Институт проблем машиноведения Российской академии наук,  
199178 Санкт-Петербург, Россия

E-mail: avak@microm.ipme.ru

(Поступила в Редакцию 19 июня 2007 г.

В окончательной редакции 16 августа 2007 г.)

Релаксация поля директора  $\hat{n}$  и поля скорости  $\mathbf{v}$ , а также сдвиговых и нормальных компонент тензора напряжений в гибридной жидкокристаллической (ГЖК) ячейке с неодинаково нагретыми ограничивающими поверхностями исследованы теоретически. Численно решена система нелинейных гидродинамических уравнений, описывающих переориентацию директора с учетом поля  $\mathbf{v}$ , инициируемого, с одной стороны, переориентацией поля директора, а с другой — градиентом температуры. Время релаксации и влияние поля скорости на процессы релаксации исследованы для ряда гидродинамических режимов, возникающих в ГЖК под действием поля температуры.

PACS: 61.30.Cz, 64.70.Md

## 1. Введение

Технологический прогресс в производстве современных электронных приборов, таких как портативные компьютеры, мобильные телефоны или органайзеры, ключевым элементом которых являются жидкокристаллические (ЖК) дисплеи, связан кроме всего прочего с созданием ультрабыстрых оптических переключателей (УБОП). Основным элементом таких УБОП являются ЖК-ячейки, и изучению воздействия внешних условий на структурные и релаксационные свойства ЖК-ячеек, время жизни и устойчивость этих электронных приборов придается огромное значение. Прочие важные внешние воздействия, которым подвержены УБОП, такие как электрические и магнитные поля, температурные градиенты, обусловленные незначительным перепадом температур на поверхностях ЖК-ячеек, могут также сильно повлиять как на структурные и релаксационные свойства этих ячеек, так и на время активной жизни ЖК-дисплеев. А поскольку в процессе активной эксплуатации любого электронного прибора с неизбежностью возникают перепады температур, изучение воздействия температурных полей на релаксационные и структурные характеристики ЖК-ячеек становится более чем актуальным. Необходимо также отметить, что вопросу о влиянии температурных полей на релаксационные и динамические свойства ЖК-фаз уделяется неоправданно мало внимания [1], поэтому мы попытаемся в какой-то степени восполнить этот пробел. Будучи возмущенным под действием градиента температуры, поле директора  $\hat{n}(t, \mathbf{r})$  в ЖК-ячейке релаксирует к равновесному состоянию  $\hat{n}_{eq}(\mathbf{r})$ , при котором директор образует равновесный угол  $\theta_{eq}(\mathbf{r})$  с нормалью по отношению к ограничивающим поверхностям ЖК-ячейки. В рамках классической гидродинамики ЖК Эриксона–Лесли [2,3] эволюцию угла  $\theta(t, \mathbf{r})$  к его равновесному значению можно рассчитать, основывая-

ясь на балансе моментов, действующих на единичный элемент ЖК-фазы. Однако всякий физический процесс, обусловленный переориентацией директора, инициирует поле скоростей  $\mathbf{v}(t, \mathbf{r})$  в ЖК-ячейке, которое в свою очередь взаимодействует с полем директора  $\hat{n}(t, \mathbf{r})$  и полем температуры  $T(t, \mathbf{r})$ . Это так называемый эффект обратного течения [4]. Точное исследование эффекта обратного течения может быть осуществлено в рамках гидродинамического описания системы, построенной на балансе вращательных моментов, линейных моментов (аналога уравнения Навье–Стокса) и уравнения теплопроводности для такой анизотропной среды, как нематический ЖК. Наличие градиента температуры  $\nabla T(t, \mathbf{r})$  приводит к появлению дополнительных, к уже существующим гидродинамическим напряжениям, касательных термомеханических напряжений [5], а также дополнительного вклада в баланс моментов и к необходимости учета уравнения теплопроводности для ЖК-фазы с двумя коэффициентами теплопроводности вдоль и поперек направления директора  $\hat{n}(t, \mathbf{r})$ . При этом экспериментально было показано [6], что наличие градиента температуры в гибридной ЖК (ГЖК) ячейке ведет к возникновению гидродинамического потока, направленного параллельно горизонтальным ограничивающим поверхностям. Однако к настоящему времени отсутствует удовлетворительное описание процесса возникновения и эволюции этих потоков и деформаций поля директора в различных условиях, обусловленных различными температурными режимами и характером сцепления ЖК-молекул с ограничивающими поверхностями. В настоящей работе исследована переориентация поля директора и поля скоростей, а также релаксация поля температур к его равновесному распределению в ГЖК-ячейках в зависимости от характера градиента температур и сцепления ЖК-молекул со стенками ячейки.

## 2. Основные гидродинамические уравнения и их решение

Состояние ГЖК-ячейки, находящейся под влиянием градиента поля температуры  $\nabla T(t, \mathbf{r})$ , определяется балансом упругого  $\mathbf{T}_{\text{elast}}$ , вязкого  $\mathbf{T}_{\text{vis}}$ , термомеханического  $\mathbf{T}_{\text{tm}}$  моментов, действующих на единицу объема ЖК-фазы, аналогом уравнения Навье–Стокса для поля скорости  $\mathbf{v}(t, \mathbf{r})$  и уравнением теплопроводности для такой анизотропной системы, как нематический жидкий кристалл (НЖК). Гибридная ориентация ЖК-ячейки предполагает, что на одной из ограничивающих поверхностей ячейки достигается гомеотропная ориентация директора, например  $\hat{\mathbf{n}} \parallel \hat{\mathbf{k}}(z=0)$ , в то время как на другой — планарная ориентация директора,  $\hat{\mathbf{n}} \perp \hat{\mathbf{k}}(z=d)$ . Здесь вектор  $\hat{\mathbf{k}}$  совпадает с осью  $z$  и направлен ортогонально обоим ограничивающим поверхностям ЖК-ячейки толщиной  $d$ , в то время как вектор  $\hat{\mathbf{i}} \perp \hat{\mathbf{k}}$  совпадает с направлением оси  $x$ , а вектор  $\hat{\mathbf{j}}$  ортогонален обоим векторам  $\hat{\mathbf{i}}$  и  $\hat{\mathbf{k}}$ . В дальнейшем будем полагать, что  $\hat{\mathbf{n}}$  в процессе переориентации остается в плоскости, образованной направлением директора, для случая планарной ориентации, совпадающим с осью  $x$ , и направлением градиента температуры, совпадающим с осью  $z$ . Это позволяет нам считать все физические величины зависящими только от координаты  $z$ . С учетом изложенного выражение для директора принимает вид  $\hat{\mathbf{n}} = \sin \theta(t, z)\hat{\mathbf{i}} + \cos \theta(t, z)\hat{\mathbf{k}}$ , а уравнение Навье–Стокса может быть записано в виде

$$\rho_m \partial_t v_i(t, z) = \partial_z \sigma_{zi} \quad (i = x, z), \quad (1)$$

где  $\partial_t = \partial/\partial t$ ,  $\rho_m$  — плотность материала,  $\mathbf{v} = v_x(t, z)\hat{\mathbf{i}} + v_z(t, z)\hat{\mathbf{k}}$  — скорость,  $\sigma_{ij}$  ( $i, j = x, z$ ) — компоненты тензора напряжений несжимаемого НЖК, которые выражаются через компоненты директора, градиентов вектора скорости и температуры [2–5]. Момент силы, действующей на единицу объема ЖК, обусловленный упругими силами Франка, может быть записан в виде [2]  $\mathbf{T}_{\text{elast}} = -\left[-\frac{1}{2}\mathcal{G}_\theta \theta_z^2 + (\mathcal{G}(\theta)\theta_z)_z\right]\hat{\mathbf{j}}$ , где  $\mathcal{G}(\theta) = (K_1(T)\sin^2 \theta + K_3(T)\cos^2 \theta)$ ,  $\theta_z \equiv \partial\theta(t, z)/\partial z$ ,  $\theta_{zz} = \partial^2\theta(t, z)/\partial z^2$ ,  $K_1(T)$  и  $K_3(T)$  — упругие постоянные Франка, соответствующие поперечному и продольному изгибам, которые в настоящей работе зависят от температуры. Момент гидродинамических сил может быть записан в виде [3,4]  $\mathbf{T}_{\text{vis}} = [\gamma_1(T)\theta_t - \frac{1}{2}(\gamma_1(T) - \gamma_2(T)\cos 2\theta)v_{x,z}(t, z)]\hat{\mathbf{j}}$ , где  $\gamma_1(T)$  и  $\gamma_2(T)$  — коэффициенты вращательной вязкости НЖК, зависящие от температуры. В рамках нашей задачи кроме указанных двух моментов мы должны учесть вклад момента, обусловленного градиентом поля температуры  $\nabla T$ , который примет вид  $\mathbf{T}_{\text{tm}} = \xi\theta_z T_z [1/2 + \sin^2 \theta]\hat{\mathbf{j}}$ , где  $\xi$  — термомеханическая постоянная [5], имеющая размерность  $[J/m \cdot K]$ , а  $T_z = \partial T(t, z)/\partial z$ . Последнее выражение  $T_{\text{tm}}$  является

следствием пространственной инвариантности относительно вращений вокруг оси  $\hat{\mathbf{n}}$  и одновременно замены  $\hat{\mathbf{n}} \rightarrow -\hat{\mathbf{n}}$ , что позволило нам записать термомеханическую часть диссипационной функции в виде

$$R_{\text{tm}} = \xi\theta_z T_z (1/2 + \sin^2 \theta) - \xi T_z v_{x,z} \theta_z \sin^2 \theta \left(1 + \frac{1}{2} \sin^2 \theta\right). \quad (2)$$

Таким образом, баланс моментов, действующих на единицу объема ЖК-фазы принимает вид

$$\gamma_1(T)\theta_t = \mathcal{A}(\theta)u_z - \frac{1}{2}\mathcal{G}_\theta(\theta)\theta_z^2 + (\mathcal{G}(\theta)\theta_z)_z - \xi\theta_z T_z \left(\frac{1}{2} + \sin^2 \theta\right), \quad (3)$$

где  $u \equiv v_x(t, z)$  и  $\mathcal{A}(\theta) = \frac{1}{2}(\gamma_1(T) - \gamma_2(T)\cos 2\theta)$ .

Условие несжимаемости нематика  $\nabla \cdot \mathbf{v} = 0$  вместе с условием отсутствия скольжения на границах ГЖК-ячейки  $\mathbf{v}_{z=0,d} = 0$  приводит к тому, что в нашей плоской задаче присутствует только одна компонента вектора скорости  $\mathbf{v} = v_x \hat{\mathbf{i}} + v_z \hat{\mathbf{k}}$ , направленная параллельно ограничивающим поверхностям. Таким образом, в уравнениях (1) ненулевыми вкладками являются  $u(t, z) = v_x(t, z)$ , касательное напряжение  $\sigma_{zx}$  и давление  $P$  при ( $i = z$ ). Сдвиговая компонента  $\sigma_{zx}$  выражается в терминах коэффициентов Лесли  $\alpha_i$  ( $i = 1, \dots, 6$ ), зависящими от температуры, и термомеханического коэффициента  $\xi$  в виде

$$\sigma_{zx} = h(\theta)u_z - \mathcal{A}(\theta)\theta_t - \xi T_z \theta_z \sin^2 \theta \left(1 + \frac{1}{2} \sin^2 \theta\right), \quad (4)$$

где  $u_z = \partial u(t, z)/\partial z$ ,  $h(\theta) = \alpha_1(T)\sin^2 \theta \cos^2 \theta - \frac{1}{2}\mathcal{A}(\theta) + \frac{1}{2}\alpha_4(T) + g(\theta)$  и  $g(\theta) = \frac{1}{2}(\alpha_2(T)\cos^2 \theta - \alpha_3(T)\sin^2 \theta)$ . В выражении (4) к обычному вязкому сдвиговому напряжению добавлен вклад, обусловленный температурным сдвиговым напряжением, равный  $\partial R_{\text{tm}}/\partial \theta_t$  [5]. С учетом этих обстоятельств уравнения (1) принимают вид

$$\rho_m \partial_t u(t, z) = \partial_z \sigma_{zx}, \quad (5)$$

$$P_z + \frac{\partial R(t, z)}{\partial \theta_t} \theta_z = 0. \quad (6)$$

Последнее уравнение подразумевает, что  $P > 0$  есть сжимающее гидростатическое давление в гибридной ЖК-ячейке, которое состоит из двух слагаемых: вязкого вклада, определяемого величиной  $\int_0^z \frac{\partial R(t, z)}{\partial \theta_t} \theta_z dz$ , и упругого вклада, представленного потенциалом Франка  $\frac{1}{2}(K_1 \sin^2 \theta + K_3 \cos^2 \theta)\theta_z^2$ .

Диссипационная функция  $R(t, z)$  зависит квадратичным образом от угловой скорости поворота директора  $\theta_t$ , что приводит (см. (6)) к линейной зависимости

вязкого вклада в давление от  $\theta_t$ . В конечном счете это позволяет использовать уравнение (1) для определения поля давления  $P(t, z)$  в гибридной ЖК-ячейке при известных функциях  $\theta(t, z)$  и  $u(t, z)$ . Для определения этих полей нам необходимо уравнение, описывающее теплопроводность анизотропной ЖК-фазы. Принимая во внимание тот факт, что поле температуры  $T(t, z)$  релаксирует к его стационарному распределению по толщине гибридной ЖК-ячейки значительно быстрее, чем поле директора и поле скоростей, в дальнейшем рассмотрим только стационарный аналог уравнения теплопроводности, которое принимает вид

$$[T_z(\Lambda \cos^2 \theta + \sin^2 \theta)]_z = 0, \quad (7)$$

где  $\Lambda = \Lambda_{\parallel}/\Lambda_{\perp}$ ,  $\Lambda_{\parallel}$  и  $\Lambda_{\perp}$  — коэффициенты теплопроводности вдоль и поперек направления директора. В дальнейшем будем полагать, что градиент температуры создается посредством неодинакового нагрева ограничивающих поверхностей ЖК-ячейки, например  $T_{z=0} = T_1$  и  $T_{z=d} = T_2$  соответственно. Будем считать, что  $T_1$  и  $T_2$  принадлежат температурному интервалу существования ЖК-фазы. С учетом изложенного уравнение (7) имеет решение

$$T(t, z) = \frac{\Delta T}{I} \int_0^z \frac{dz}{\Lambda \cos^2 \theta + \sin^2 \theta} + T_1, \quad (8)$$

где  $I = \int_0^d \frac{dz}{\Lambda \cos^2 \theta + \sin^2 \theta}$ , а  $\Delta T = T_2 - T_1$ .

С целью изучения эволюции угла  $\theta(t, z)$  и скорости  $u(t, z)$  к их равновесным значениям перейдем к безразмерным аналогам уравнений (3), (5) и (8), которые принимают вид

$$\theta_{\tau} = \overline{\mathcal{A}}(\theta)u_z + (\overline{\mathcal{G}}(\theta)\theta_z)_z - \frac{1}{2}\overline{\mathcal{G}}_{\theta}\theta_z^2 - \delta_1\chi_z\theta_z \left( \frac{1}{2} + \sin^2 \theta \right), \quad (9)$$

$$\delta_2\partial_{\tau}u(\tau, z) = \partial_z\overline{\sigma}_{zx}, \quad (10)$$

$$\chi(\tau, z) = \frac{\Delta\chi}{\overline{T}} \int_0^z \frac{dz}{\Lambda \cos^2 \theta + \sin^2 \theta} + \chi_1. \quad (11)$$

Здесь  $\overline{T} = \int_0^1 [\Lambda \cos^2 \theta + \sin^2 \theta]^{-1} dz$ ,  $\overline{z} = z/d$  — безразмерное расстояние от нижней ограничивающей поверхности гибридной ячейки,  $\tau = tK_{10}/\gamma_{10}d^2$  — безразмерное время,  $\gamma_{10}$  и  $K_{10}$  — значения вращательной вязкости и поперечного изгиба, соответствующие наименьшим значениям внутри интервала температур  $[T_1, T_2]$ ,  $\chi(\tau, z) = T(\tau, z)/T_{NI}$  — безразмерная температура,  $T_{NI}$  — значение температуры, соответствующее переходу нематик-изотропная жидкость,  $\overline{\mathcal{A}}(\theta) = \mathcal{A}(\theta)/\gamma_{10}$ ,

$\overline{\mathcal{G}}(\theta) = \mathcal{G}(\theta)/K_{10}$ , а

$$\overline{\sigma}_{zx} = \frac{\sigma_{zx}}{\gamma_{10}} = \overline{h}(\theta)u_z - \overline{\mathcal{A}}(\theta)\theta_{\tau} - \delta_1\chi_z\theta_z \sin^2 \theta \left( 1 + \frac{1}{2} \sin^2 \theta \right), \quad (12)$$

где  $\overline{h}(\theta) = h(\theta)/\gamma_{10}$ , а  $\delta_1 = \xi T_{NI}/K_{10}$  и  $\delta_2 = \rho_m K_{10}/\gamma_{10}^2$  являются параметрами системы. Черта над безразмерными переменными в уравнениях (9)–(11) впоследствии опущена.

Рассмотрим ГЖК-ячейку, характеризующуюся сильным и слабым взаимодействиями молекул ЖК с ограничивающими поверхностями. В случае сильного сцепления молекул ЖК с ограничивающими поверхностями граничными условиями являются

$$\theta_{z=0} = 0, \quad \theta_{z=1} = \frac{\pi}{2}, \quad (13)$$

характеризующиеся гомеотропной ориентацией ЖК-молекул на нижней и планарной на верхней ограничивающих поверхностях, и условия

$$\theta_{z=0} = \frac{\pi}{2}, \quad \theta_{z=1} = \pi, \quad (14)$$

характеризующиеся планарной ориентацией ЖК-молекул на нижней и гомеотропной на верхней ограничивающих поверхностях. В случае слабого сцепления директора  $\hat{n}$  с ограничивающей поверхностью энергия этого взаимодействия будет рассматриваться в форме Рапини [7]:  $W = 1/2A \sin^2(\theta_s - \theta_0)$ , где  $A$  — плотность энергии сцепления,  $\theta_s$  и  $\theta_0$  — углы, соответствующие ориентации директора на твердой поверхности  $\hat{n}_s$  и оси преимущественного (легкого) ориентирования  $\hat{e}$ . Баланс моментов, перенесенный только на одну, например нижнюю, поверхность, приводит к условию, которому должна удовлетворять ориентация директора на этой поверхности

$$\overline{\mathcal{G}}(\theta) \left( \frac{\partial \theta}{\partial z} \right)_{z=0} = \frac{Ad}{2K_1} \sin 2\Delta\theta, \quad (15)$$

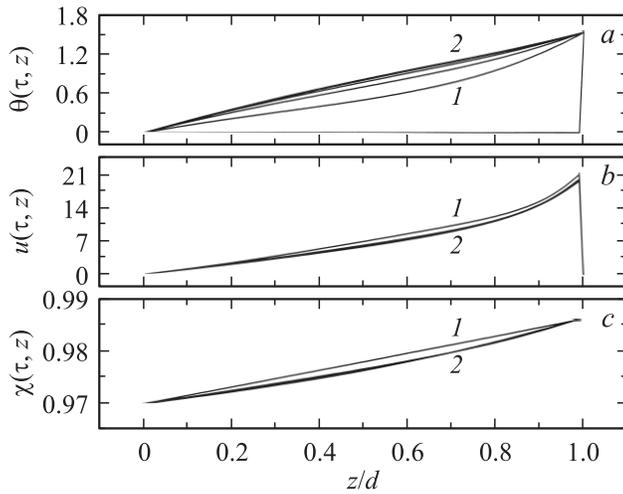
при этом на другой поверхности сохраним строго гомеотропную ориентацию

$$\theta_{z=1} = 0, \quad (16)$$

где  $\Delta\theta = \theta_s - \theta_0$ . Начальная ориентация директора распределена перпендикулярно обеим поверхностям  $\theta(0, z) = 0$  ( $0 < z < 1$ ), а затем директор релаксирует к своему равновесному значению  $\theta_{eq}(z)$ . Граничное условие для поля скорости принимает вид

$$u(z)_{z=0}, \quad u(z)_{z=1} = 0. \quad (17)$$

Процесс переориентации поля директора в ГЖК-ячейке, когда режим релаксации определяется вязкими,



**Рис. 1.** Релаксация угла  $\theta(\tau, z)$  (a), поля скорости  $u(\tau, z)$  (b) и поля температуры  $\chi(\tau, z)$  (c) к их равновесным распределениям по сечению ГЖК-ячейки. Кривые от 1 к 2 — решения уравнений (9)–(11) с граничными условиями (13) и (17) при  $\chi_{z=0} = 0.97$  и  $\chi_{z=1} = 0.9862$ , соответствующие моментам времени от  $\tau(1) = 0.04$  до  $\tau(2) = \tau_R = 0.18$ .

упругими и температурными силами, с учетом влияния гидродинамических и термомеханических эффектов может быть изучен с помощью решения системы нелинейных дифференциальных уравнений в частных производных (9)–(11). Граничными условиями для угла  $\theta(\tau, z)$  для случая сильного сцепления молекул ЖК с ограничивающими поверхностями являются уравнения (13), (14), для случая смешанного (слабо-сильного) сцепления директора — уравнения (15), (16), а для поля скорости — уравнения (17).

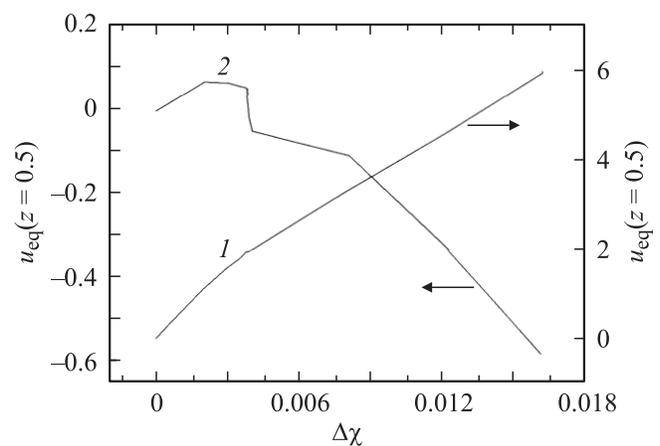
Для нематика 4-*n*-пентил-4'-цианобифенил (5ЦБ) в области температур существования нематической фазы  $296 < T < 307.5$  К плотность ЖК  $10^3$  kg/m<sup>3</sup>, а значения экспериментальных данных для упругой постоянной составляет  $K_{10} \sim 9.5$  pN [8], в то время как экспериментальные данные для  $A$ , полученные различными экспериментальными методами [9], имеют порядок  $\sim 10^{-7}$  J/m<sup>2</sup>. В дальнейшем используется значение вязкости  $\gamma_{10} = 0.072$  Pa · s [10]. Значения шести коэффициентов Лесли (в Pa · s) и двух упругих коэффициентов  $K_1(T)$  и  $K_3(T)$  были оценены в соответствии с экспериментальными данными [10] и [8], в то время как значение термомеханического коэффициента  $\xi \sim 10^{-12}$  J/m · K [6]. С учетом изложенного два безразмерных параметра равны  $\delta_1 \sim 30$  и  $\delta_2 \sim 10^{-5}$ . Поскольку  $\delta_2 \ll 1$ , уравнение (10) принимает вид

$$\bar{\sigma}_{zx} = C(\tau), \quad (18)$$

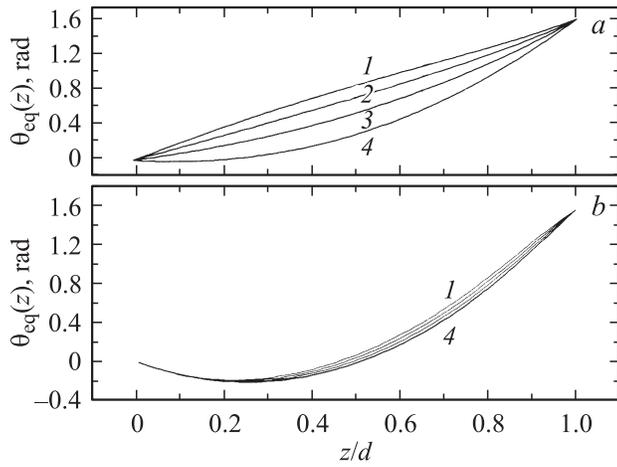
где функция времени  $C(\tau)$  находится из условия (17).

Релаксация директора в ГЖК-ячейке к его равновесному положению  $\hat{n}_{eq}$ , которая описывается полярным углом  $\theta(\tau, z)$ , релаксация поля скорости  $u(\tau, z)$  и поля температуры  $\chi(\tau, z) = T(\tau, z)/T_{NI}$  для случая сильного

сцепления молекул ЖК с ограничивающими поверхностями и направления градиента температуры от нижней поверхности ( $\chi_{z=0} = 0.97$ ) к верхней ( $\chi_{z=1} = 0.9862$ ) были исследованы численно методом релаксации [11] и представлены на рис. 1. Кривые на рис. 1, a соответствуют релаксации  $\theta(\tau, z)$  по всему сечению ЖК-ячейки от момента времени  $\tau = 0.04$  ( $\sim 2.8$  s) (кривая 1) и до  $\tau_R \sim 0.18$  ( $\sim 12.8$  s) (кривая 2), для случая, когда безразмерная температура на нижней поверхности ЖК-ячейки была ниже температуры на верхней поверхности этой же ячейки, а граничные условия удовлетворяли уравнениям (13). Кривые на рис. 1, b и c описывают релаксацию поля скорости  $u(\tau, z)$  и температуры  $\chi(\tau, z)$  по всему сечению этой же ЖК-ячейки при условии, что граничные условия удовлетворяют уравнениям (13) и (17). Перепад безразмерной температуры  $\Delta\chi = 0.0162$  соответствует скачку температуры в 5 К. Результаты вычислений показали, что распределение скорости  $u(\tau, z)$  по сечению ЖК-ячейки характеризуется максимумом вблизи верхней ( $z = 1$ ) более теплой поверхности ЖК-ячейки, а сам гидродинамический поток направлен в положительном направлении вдоль оси  $x$ . Величина этого гидродинамического потока  $u(\tau, z)$  образована двумя вкладками: первым, обусловленным переориентацией поля директора  $\hat{n}(\tau, z)$ , и вторым, обусловленным градиентом температуры. Первый вклад в общий поток релаксирует к нулю ( $\lim_{\tau \rightarrow \tau_R} u^h(\tau, z) \rightarrow 0$ ) в то время как второй вклад релаксирует к равновесному распределению  $u_{eq}(z)$  по всему сечению ЖК-ячейки. На рис. 2 представлены результаты расчета равновесного поля скорости  $u_{eq}(z = 0.5)$  в середине ЖК-ячейки в зависимости от величины перепада температуры  $\Delta\chi = \chi_{z=1} - \chi_{z=0}$  на верхней и нижней ограничивающих поверхностях для двух противоположных направлений градиента температуры. На рис. 2, a представлена зависимость  $u_{eq}(\Delta\chi)$



**Рис. 2.** Зависимость равновесной скорости  $u_{eq}(z = 0.5)$ , вычисленной в середине ГЖК-ячейки, от перепада температуры  $\Delta\chi$  для двух направлений градиента температуры. В первом случае температурное поле задавалось граничными условиями  $\chi_{z=0} = 0.97$  и  $\chi_{z=1} = 0.9862$  (1), во втором  $\chi_{z=0} = 0.9862$  и  $\chi_{z=1} = 0.97$  (2).



**Рис. 3.** Распределения равновесного угла  $\theta_{eq}(z)$  по сечению ГЖК-ячейки для четырех значений перепадов температуры  $\Delta\chi = 0.0162$  (1), 0.012 (2), 0.008 (3) и 0.004 (4) и двух направлений градиента температуры. В первом случае температурное поле задавалось граничными условиями  $\chi_{z=0} = 0.97$  и  $\chi_{z=1} = 0.9862$  (a), во втором случае  $\chi_{z=0} = 0.9862$  и  $\chi_{z=1} = 0.97$  (b).

для случая, когда градиент температуры направлен в сторону верхней границы, в то время как на рис. 2, b градиент температуры направлен в противоположную сторону. В первом случае величина  $u_{eq}(z = 0.5)$  монотонно растет в зависимости от  $\Delta\chi$ , в то время как во втором случае зависимость  $u_{eq}(\Delta\chi)$  характеризуется слабой осцилляцией в интервале температур  $0 < \Delta\chi < 0.008$  с последующим монотонным ростом  $u_{eq}(z = 0.5)$  вплоть до значений температур  $\Delta\chi = 0.0162$ . При этом в области температур  $0 < \Delta\chi < 0.004$  обнаружено слабое гидродинамическое течение в положительном направлении, в то время как в области температур  $0.004 < \Delta\chi < 0.0162$  мы наблюдаем устойчивый рост величины скорости гидродинамического течения  $u_{eq}(z = 0.5)$  в отрицательном направлении в зависимости от  $\Delta\chi$  (рис. 2, b). На рис. 3 представлены равновесные распределения угла  $\theta_{eq}(z)$  по сечению ГЖК-ячейки для четырех значений перепада температуры  $\Delta\chi = 0.0162$  (кривые 1), 0.012 (кривые 2), 0.008 (кривые 3) и 0.004 (кривые 4) и двух направлений градиента температуры. Первый температурный режим, когда температура на нижней поверхности ГЖК-ячейки выше температуры на верхней, соответствует рис. 3, a, второй, когда температура на верхней поверхности ГЖК-ячейки выше, чем на нижней, — рис. 3, b. В первом случае с ростом перепада температуры  $\Delta\chi$  распределение угла  $\theta_{eq}(z)$  становится практически линейным (рис. 3, a), в то время как во втором случае профиль  $\theta_{eq}(z)$  практически не меняется и характеризуется областью с отрицательными значениями угла  $\theta_{eq}(z)$  вблизи нижней ограничивающей поверхности (рис. 3, b). Такое поведение  $\theta_{eq}(z)$  обусловлено тем, что вблизи нижней ограничивающей поверхности ГЖК-ячейки мы имеем дело с небольшим гидродинамическим потоком

в отрицательном направлении. Для расчета сдвиговой компоненты тензора напряжений  $\bar{\sigma}_{xz}$  воспользуемся соотношением  $\bar{\sigma}_{zx} - \bar{\sigma}_{xz} = \frac{\partial R}{\partial \theta}$ , связывающим компоненты тензора напряжений  $\bar{\sigma}_{ij}$  и диссипационную функцию Рэлея  $R$  [4]. С учетом уравнения (12) последнее соотношение принимает вид

$$\bar{\sigma}_{xz}(\tau, z) = \bar{\sigma}_{zx}(\tau) + (\bar{\mathcal{G}}(\theta)\theta_z)_z - \frac{1}{2}\bar{\mathcal{G}}_\theta\theta_z^2, \quad (19)$$

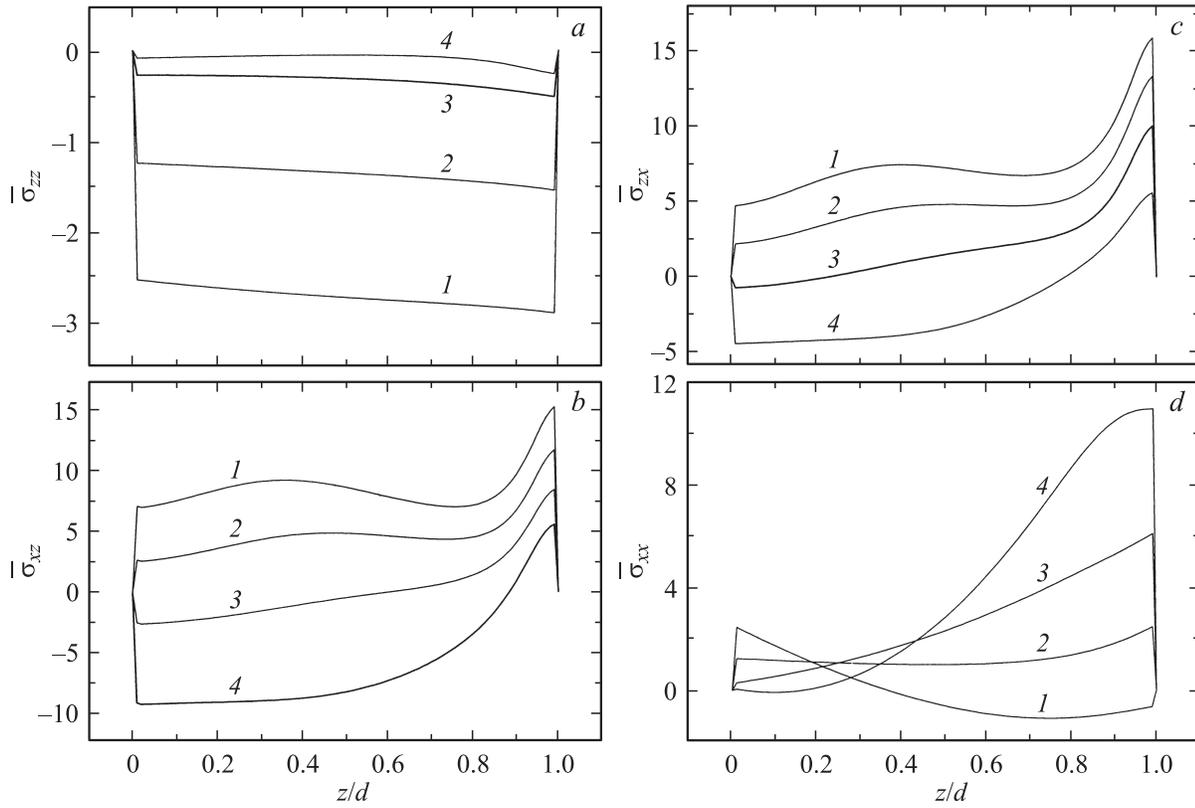
а выражение (6) позволяет найти нормальные компоненты тензора напряжений  $\bar{\sigma}_{ii}$  ( $i = x, z$ )

$$\bar{\sigma}_{xx}(\tau, z) = -\bar{P}(\tau, z), \quad (20)$$

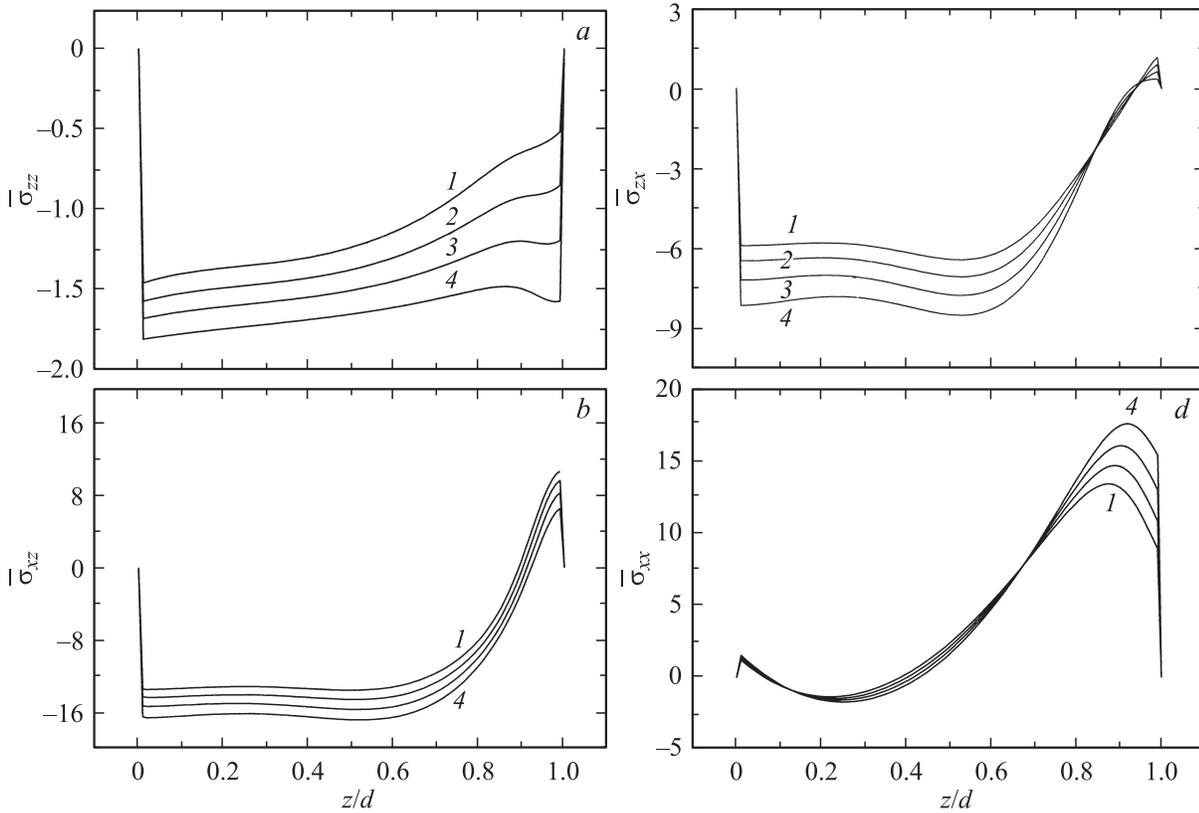
$$\bar{\sigma}_{zz}(\tau, z) = -\bar{P}(\tau, z) - \left( \frac{K_1(t)}{K_{10}} \sin^2 \theta + \frac{K_3(t)}{K_{10}} \cos^2 \theta \right) \theta_z^2, \quad (21)$$

где  $\bar{P} = Pd^2/K_{10}$  — безразмерное давление, полученное в результате интегрирования безразмерного аналога уравнения (6), с учетом решений  $u(\tau, z)$  и  $\theta(\tau, z)$  соответственно. Численные методы позволяют рассчитать характер релаксации компонент тензора  $\bar{\sigma}_{ij}$  ( $i, j = x, z$ ) в ГЖК-ячейке с учетом гидродинамического и термомеханического эффектов. На рис. 4 и 5 представлены результаты расчетов профилей  $\bar{\sigma}_{zx}(z)$ ,  $\bar{\sigma}_{xz}(z)$ ,  $\bar{\sigma}_{xx}(z)$ ,  $\bar{\sigma}_{zz}(z)$  по сечению ЖК-ячейки для четырех значений перепада температуры  $\Delta\chi = 0.0162$  (кривые 1), 0.012 (кривые 2), 0.008 (кривые 3) и 0.004 (кривые 4) и двух направлений градиента температуры. Для первого направления, когда температура на нижней поверхности ГЖК-ячейки ниже температуры на верхней, результаты расчета приведены на рис. 4, для второго направления, когда температура на верхней поверхности ГЖК-ячейки ниже, чем на нижней, — рис. 5. В первом случае с ростом перепада температуры  $\Delta\chi$  распределение касательных напряжений  $\bar{\sigma}_{xz}(z)$  (рис. 4, b) и  $\bar{\sigma}_{zx}(z)$  (рис. 4, c) претерпевает качественное изменение.

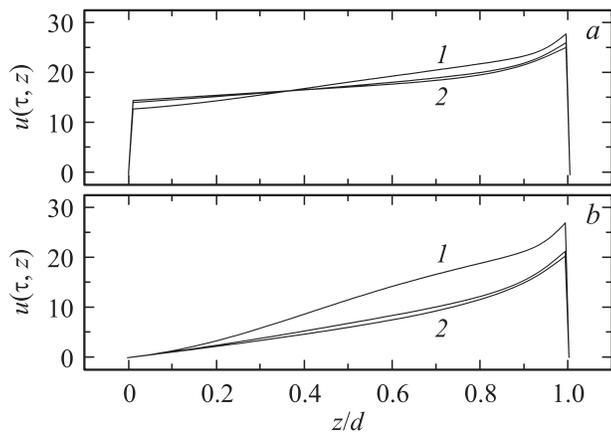
Отрицательные значения этих напряжений при  $\Delta\chi = 0.004$  и 0.008 вблизи нижней и положительные вблизи верхней ограничивающих поверхностей релаксируют к положительным значениям напряжений по всему профилю ЖК-ячейки при  $\Delta\chi = 0.012$  и 0.016 с явно выраженным максимумом вблизи верхней поверхности. Физически это означает, что система испытывает растяжение, характеризующееся максимумом вблизи  $z = 1$ . Осевое сжатие вдоль оси  $z$  (рис. 4, a) возрастает с ростом  $\Delta\chi$  практически равномерно по всему профилю ЖК-ячейки, в то время как напряжение вдоль оси  $x$  представляет собой более сложную функцию  $\bar{\sigma}_{xx}(z)$  (рис. 4, d). Незначительное растяжение вблизи  $z = 0$  и сжатие вблизи  $z = 1$  при малых  $\Delta\chi = 0.004$  сменяются большим растяжением ( $\bar{\sigma}_{xx} \sim 10$  (0.01 Pa)) вблизи верхней границы ( $z = 1$ ) и практически полным отсутствием растяжения вблизи нижней границы ( $z = 0$ ) при больших  $\Delta\chi = 0.0162$ . Перепад безразмерной температуры  $\Delta\chi = 0.0162$  соответствует скачку температуры в 5 К. Во втором случае, когда температура на верхней поверхности ГЖК-ячейки ниже, чем температура на нижней



**Рис. 4.** Распределение равновесных напряжений  $\bar{\sigma}_{zz}(z)$  (a),  $\bar{\sigma}_{xz}(z)$  (b),  $\bar{\sigma}_{zx}(z)$  (c) и  $\bar{\sigma}_{xx}(z)$  (d) по сечению ГЖК-ячейки для четырех значений перепадов температуры  $\Delta\chi = 0.0162$  (1), 0.012 (2), 0.008 (3) и  $\Delta\chi = 0.004$  (4) и направления градиента температуры, заданного граничным условием  $\chi_{z=0} = 0.97$  и  $\chi_{z=1} = 0.9862$ .



**Рис. 5.** То же, что на рис. 4, в случае, когда направление градиента температуры задано граничным условием  $\chi_{z=0} = 0.9862$  и  $\chi_{z=1} = 0.97$ .



**Рис. 6.** Распределение поля скорости  $u(\tau, z)$  в различные моменты времени от  $\tau = 0.01$  (1) до  $\tau = \tau_R = 0.25$  (2) при релаксации к равновесному распределению  $u_{eq}(z)$  по всей толщине ГЖК. *a* — кривые построены на основании вычислений с помощью уравнений (9)–(11) с граничными условиями (15) при  $z = 0$  и значении угла  $\theta_{z=1} = \pi/2$ . *b* — то же, что на части *a*, при граничных условиях в виде (14), соответствующих жесткому сцеплению ЖК-молекул с ограничивающими поверхностями и граничными условиями для поля температуры  $\chi_{z=0} = 0.97$  и  $\chi_{z=1} = 0.9862$ .

(рис. 5), характер поведения напряжений по сечению ЖК-ячейки меняется. Так, осевое сжатие вдоль оси  $z$  возрастает с уменьшением величины  $\Delta\chi$ , при этом ГЖК-ячейка испытывает практически равномерное сжатие (рис. 5, *a*), а осевое напряжение  $\bar{\sigma}_{xx}(z)$  представляет собой более сложную функцию  $z$ . Вблизи нижней границы ( $z = 0$ ) система испытывает незначительный перепад напряжений, от растяжения до сжатия (рис. 5, *d*), в то время как вблизи верхней границы ( $z = 1$ ) система подвергается сильному осевому растяжению ( $\bar{\sigma}_{xx} \sim 17$  (0.017 Па)). При этом оба касательных напряжения  $\bar{\sigma}_{xz}(z)$  и  $\bar{\sigma}_{zx}(z)$  ведут себя практически одинаково. Оба профиля  $\bar{\sigma}_{xz}(z)$  и  $\bar{\sigma}_{zx}(z)$  характеризуются большими отрицательными значениями вблизи  $z = 0$  и положительными значениями вблизи  $z = 1$ . При этом касательное напряжение  $\bar{\sigma}_{xz}$  превалирует над  $\bar{\sigma}_{zx}$  вблизи верхней границы ГЖК-ячейки. Переход от граничных условий типа сильного сцепления (13) или (14) к условиям типа слабого сцепления (15) требует переноса баланса моментов на одну из ограничивающих поверхностей. Это приводит к условию, которому должна удовлетворять производная полярного угла на этой поверхности, например

$$\left(\frac{\partial\theta}{\partial z}\right)_{z=0} = \frac{Ad \sin(2\Delta\theta)}{K_1} = 0.1.$$

Качество сцепления несущественно влияет на характер релаксации поля директора, в то время как характер релаксации поля скорости изменяется, во всяком случае вблизи той поверхности  $z = 0$ , где реализовано слабое сцепление молекул ЖК-фазы с ограничивающей поверх-

ностью (рис. 6, *a* и *b*). Это проявляется в наличии явно выраженного максимума  $\sim 15$  ( $\sim 21 \mu\text{m/s}$ ) в распределении профиля равновесной скорости  $u_{eq}(z)$  вблизи  $z = 0$  (рис. 6, *a*), а сам поток по всему сечению направлен в положительном направлении.

### 3. Обсуждение полученных результатов и выводы

Немногие экспериментальные исследования гидродинамических потоков в ГЖК-ячейках, возникающих благодаря поперечным градиентам температуры [6], не позволяет нам в полной мере оценить не только характер и величину этих потоков, но и времена релаксации других динамических процессов, например релаксации компонент тензора напряжений, возникающих в ГЖК-ячейках. Максимум, что удалось извлечь из этих экспериментов — оценить величину термомеханической константы  $\xi \sim 10^{-12} \text{ J/m} \cdot \text{K}$ . Тем самым роль теоретических методов, основанных на классических уравнениях гидродинамики ЖК Лесли–Эриксона, трудно переоценить в процессе создания полной картины эволюции поля директора и скоростей, а также компонент тензора напряжений. Все это в полной мере можно описать только теоретически, посредством решения нелинейных дифференциальных уравнений, учитывающих баланс вращательных и линейных моментов, и уравнения теплопроводности для НЖК. Релаксация поля директора, а также сдвиговых и нормальных компонент тензора напряжений была исследована с учетом поля скорости, индуцированного переориентацией директора в присутствии поперечного градиента температуры, возникающего в ГЖК-ячейке благодаря неодинаковому нагреву ограничивающих поверхностей ячейки. Результаты расчетов показали, что характер сцепления ЖК-молекул с ограничивающими поверхностями и направление градиента температуры может не только количественно, но и качественно изменить характер гидродинамических потоков, возникающих в ГЖК и изменить время релаксации как поля директора, так и компонент тензора напряжений. Все это позволяет нам надеяться, что полученные результаты численного моделирования существенно расширят спектр предполагаемых физических экспериментов с такими системами. Одним из таких экспериментов может быть эксперимент, связанный с возникновением направленного течения в узком или сверхузком канале при наличии поперечного градиента температуры и формирования на верхней ограничивающей поверхности гомеотропной, а на нижней — слабой ориентации директора. Этот эффект может быть использован при конструировании наноскопических насосов. Такие насосы могут быть использованы как в биологических системах, так и в медицине.

Мы надеемся, что настоящая работа некоторым образом освещает проблему описания процессов переориентации поля директора в ЖК-ячейках при наличии поперечного градиента температуры.

## Список литературы

- [1] P.G. de Gennes, J. Prost. The physics of liquid crystals. Oxford University Press, Oxford (1995). 349 p.
- [2] J.L. Ericksen. Arch. Ration. Mech. Anal. **4**, 231 (1960).
- [3] F.M. Leslie. Arch. Ration. Mech. Anal. **28**, 265 (1968).
- [4] I.W. Stewart. The static and dynamic continuum theory of liquid crystals. Taylor and Francis, London (2004). 345 p.
- [5] P.C. Акопян, Б.Я. Зельдович. ЖЭТФ **87**, 1660 (1984).
- [6] P.C. Акопян, Р.Б. Алавердян, Э.Н. Сантросян, Ю.С. Чилингарян. Письма в ЖТФ **23**, 77 (1997).
- [7] A. Rapini, M. Papoular. J. Phys. Colloq. (Paris) **30**, 4 (1069).
- [8] P.P. Karat, N.V. Madhusudana. Mol. Cryst. Liq. Cryst. **40**, 239 (1977).
- [9] L.M. Blinov, A.Yu. Kabaenkov, A.A. Sonin. Liq. Cryst. **5**, 645 (1989).
- [10] A.G. Chmielewski. Mol. Cryst. Liq. Cryst. **132**, 339 (1986).
- [11] И.С. Березин, Н.Р. Жидков. Методы вычислений. Физматгиз, М. (1964). 464 с.