

Аномальные процессы переориентации в гибридно-ориентированных жидкокристаллических ячейках под действием градиента температуры

© А.В. Захаров, А.А. Вакуленко

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

E-mail: avak2vale@mail.ru

(Поступила в Редакцию 25 декабря 2007 г.)

Исследована ориентационная релаксация не только поля директора и поля скорости, но и поля температуры и компонент тензора напряжений в гибридно-ориентированной жидкокристаллической ячейке под действием градиента температуры. Проведено численное исследование аномалий процесса ориентационной релаксации указанных полей в случае, когда температура одной из ограничивающих поверхностей близка к температуре фазового перехода нематик–смектик А.

PACS: 61.30.Cz, 64.70.Md

1. Введение

В последнее время вопросу о влиянии градиентов температуры на релаксационные, гидродинамические и структурные свойства жидкокристаллических (ЖК) ячеек уделяют все больше внимания [1–5]. Это обусловлено прежде всего тем, что ЖК-ячейки, являющиеся основными элементами таких электронных приборов, как дисплеи или ультрабыстрые оптические переключатели, в процессе эксплуатации подвержены воздействию градиентов температуры, возникающих, например, в результате неравномерного нагревания их ограничивающих поверхностей. Наличие градиента температуры ∇T в ЖК-фазе в свою очередь приводит к тому, что необходимо учитывать взаимодействие ∇T как с полем директора $\hat{\mathbf{n}}(\mathbf{r})$, так и с полем скорости $\mathbf{v}(\mathbf{r})$, инициируемым градиентом температуры. Учет этого взаимодействия отражается на балансе как угловых, так и линейных моментов, действующих на единицу объема ЖК-фазы. Поэтому правильный учет всех сил, действующих на единицу объема ЖК-фазы, не только позволит воссоздать реальную картину релаксации динамических характеристик этих электронных приборов, но и точнее оценить срок их активной эксплуатации. Следует отметить, что первое описание влияния градиента температуры на структурные свойства холестерика, помещенного между двумя стеклянными поверхностями, было опубликовано в начале XX столетия [6], но лишь спустя 68 лет было дано теоретическое обоснование этого эффекта, заключающееся в том, что в баланс моментов, действующих на единицу объема ЖК-фазы, к уже известным гидродинамическому \mathbf{T}_{vis} и упругому $\mathbf{T}_{\text{elast}}$ вкладам [7] был добавлен термомеханический $\mathbf{T}_{\text{tm}} \sim (\hat{\mathbf{n}} \times \nabla T) \times \hat{\mathbf{n}}$ вклад [8]. Это позволило рассчитать угловую скорость вращения поля директора вокруг оси, параллельной градиенту температуры. В случае гибридной ЖК- (ГЖК) ячейки, предполагающей гомеотропную ориентацию поля директора, например на нижней ограничивающей, и планарную на верхней ограничивающей

поверхности, наличие вертикального градиента температуры ведет к формированию устойчивого потока \mathbf{v} ЖК-фазы в горизонтальном направлении [2,5,9,10]. При этом величина потока $v \sim \frac{d}{\eta} \sigma_{zx}^{tm}$, где $\sigma_{zx}^{tm} \sim \xi \frac{\Delta T}{d^2}$ — сдвиговая составляющая компонента термомеханического вклада в тензор напряжения, η — вязкость ЖК-фазы, $\Delta T = T_2 - T_1 > 0$, область температур $[T_1, T_2]$ находится в пределах стабильности нематической фазы толщиной d , ξ — термомеханическая постоянная [10]. На направление и величину гидродинамического потока влияют также направление теплового потока и характер сцепления молекул ЖК-фазы с ограничивающими поверхностями [2,5]. В наших работах [2,5] были проведены исследования релаксационных режимов, возникающих в ГЖК-ячейках, образованных молекулами 4-*n*'-пентил-4'-цианобифенил (5ЦБ), для случая вертикально направленного градиента температуры. В случае ЖК-фазы, допускающей существование фазового перехода нематик–смектик А (NA), такой как 4-циано-4'-октилбифенил (8ЦБ), по мере охлаждения одной из ограничивающей поверхностей, например нижней, T приближается к T_{NA} , где T_{NA} — температура фазового перехода. При этом в нематической фазе в результате флуктуации зарождающегося локального смектического параметра порядка ряд материальных параметров обнаруживает сингулярное поведение с изменением температуры $T \rightarrow T_{NA}$. Среди этих параметров — коэффициенты Лесли $\lim_{T \rightarrow T_{NA}} \alpha_3 \sim \xi^{-\nu/2}$ и изгибной упругости $\lim_{T \rightarrow T_{NA}} K_3 \sim \xi^{-\nu}$, где $\xi = T/T_{NA} - 1$ — безразмерная температура, а ν — критический индекс [11]. Предпереходные смектические флуктуации генерируют новый момент силы \mathbf{T}_{\parallel} [12,13], действующей на единицу объема ЖК-фазы. По мере охлаждения нижней ограничивающей поверхности ГЖК-ячейки $T \rightarrow T_{NA}$; в пристенной области $[0, \xi_{\parallel}]$ зарождается новая смектическая фаза, размер которой растет как $\xi_{\parallel} = \xi_0 \xi^{-\nu}$ параллельно $\hat{\mathbf{n}}$. Все это ведет к тому, что переориентация поля директора и поля скорости, а также релаксация поля температуры к их равновесным распределениям по сечению

ГЖК-ячейки $[d, 0]$ должны плавно переходить из одной области ячейки $[d, \xi_{||}]$ в другую $[\xi_{||}, 0]$. Таким образом, релаксационные процессы, возникающие в ГЖК-ячейках в случае, когда температура одной из ограничивающих поверхностей $T \rightarrow T_{NA}$, значительно усложняются по сравнению с релаксационными процессами, характерными для ГЖК-ячеек при температурах, отличных от T_{NA} . В настоящей работе в рамках классической гидродинамики ЖК Эриксона–Лесли [14,15] с учетом влияния флуктуаций локального смектического порядка, образующегося в нематической фазе [12,13], исследованы: 1) релаксация поля директора; 2) эволюция поля скорости; 3) изменение поля температуры; 4) изменение компонент тензора напряжений — к их равновесным распределениям по сечению ГЖК-ячейки в зависимости от величины вертикального градиента температуры и характера сцепления ЖК-молекул со стенками ячейки.

2. Основные гидродинамические уравнения, описывающие состояние нематического жидкого кристалла в ограниченном объеме

Состояние ГЖК-ячейки, находящейся под действием градиента температуры $\nabla T(t, \mathbf{r})$, определяется полями директора $\mathbf{n}(t, \mathbf{r})$, вектора скорости $\mathbf{v}(t, \mathbf{r})$, температуры $T(t, \mathbf{r})$, а также полем плотности нематика. Система уравнений для этих полей состоит из уравнения, описывающего баланс упругого $\mathbf{T}_{\text{elast}}(t, \mathbf{r})$, вязкого $\mathbf{T}_{\text{vis}}(t, \mathbf{r})$ и термомеханического $\mathbf{T}_{\text{tm}}(t, \mathbf{r})$ моментов, действующих на единицу объема ЖК-фазы, уравнения, аналогичного уравнению Навье–Стокса, и уравнения теплопроводности для такой анизотропной системы, как нематический ЖК (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 направлением оси z , в то время как вектор $\hat{\mathbf{i}} \perp \hat{\mathbf{k}}$ совпадает с направлением оси x , а вектор $\hat{\mathbf{j}} = \hat{\mathbf{i}} \times \hat{\mathbf{k}}$ совпадает с направлением оси y . В дальнейшем предполагается, что $\hat{\mathbf{n}}$ в процессе переориентации под действием градиента температуры остается в плоскости, образованной направлением директора на верхней ограничивающей поверхности, совпадающей с направлением оси x , и направлением градиента температуры, совпадающим с направлением оси z . Это позволяет нам считать все физические величины зависящими только от координаты z . С учетом всего изложенного выше выражение для директора принимает вид $\hat{\mathbf{n}} = \sin \theta(t, z)\hat{\mathbf{i}} + \cos \theta(t, z)\hat{\mathbf{k}}$, где θ — полярный угол между направлением директора $\hat{\mathbf{n}}$ и нормалью $\hat{\mathbf{k}}$ к обеим границам. Следует отметить, что формирующийся за счет перепада температуры ΔT градиент температуры $\nabla T \sim \Delta T/d$ позволяет изначально покоящийся между двумя ограничивающими параллельными поверхностями

ЖК-слой обратить в движение в горизонтальном направлении со скоростью [2,5] $v \sim \xi \Delta T / \eta d$. Следует также отметить, что пространственная зависимость скорости \mathbf{v} только от координаты z , совместно с условиями несжимаемости $\nabla \cdot \mathbf{v} = 0$ и отсутствия скольжения хотя бы на одной границе ГЖК-ячейки, например $v_{z=d} = 0$, приводит к тому, что в нашей плоской задаче присутствует только одна компонента вектора скорости $\mathbf{v} = v_x(t, z)\hat{\mathbf{i}}$, направленная параллельно ограничивающим поверхностям. Таким образом, безразмерное уравнение баланса моментов, действующих на единичный объем ЖК-фазы, принимает вид [2,5]

$$\bar{y}_1(\chi)\theta_\tau = \mathcal{A}(\theta)u_z + (\mathcal{G}(\theta)\theta_z)_z - \frac{1}{2}\mathcal{G}_\theta(\theta)\theta_z^2 - \delta_1\chi_z\theta_z \left(\frac{1}{2} + \sin^2 \theta \right), \quad (1)$$

где $\tau = (K_{10}/\gamma_{10}d^2)t$ — безразмерное время, $\bar{z} = z/d$ — безразмерная координата, $u(\tau, z) = (\gamma_{10}d^2/K_{10})v_x(\tau, z)$ — безразмерная скорость, d — ширина ЖК-слоя, $\chi(\tau, z) = T(\tau, z)/T_{NI}$ — безразмерная температура, $\bar{y}_1(\chi) = \gamma_1(\chi)/\gamma_{10}$, $\mathcal{A}(\theta) = \frac{1}{2}(\gamma_1(\chi) - \gamma_2(\chi)\cos 2\theta)/\gamma_{10}$, $u_z = \partial u(\tau, z)/\partial z$, $\gamma_1(\chi)$ и $\gamma_2(\chi)$ — коэффициенты вращательной вязкости НЖК, $\mathcal{G}(\theta) = (K_1(\chi)\sin^2 \theta + K_3(\chi)\cos^2 \theta)/K_{10}$, $\theta_\tau = \partial \theta(\tau, z)/\partial \tau$, $\theta_z = \partial \theta(\tau, z)/\partial z$, $K_1(\chi)$ и $K_3(\chi)$ — упругие постоянные Франка, соответствующие поперечному и продольному изгибам, γ_{10} и K_{10} — значения вращательной вязкости и поперечного изгиба, соответствующие наибольшим значениям внутри интервала температур $[\chi_2, \chi_1] = [T_2/T_{NI}, T_1/T_{NI}]$, $\delta_1 = \xi T_{NI}/K_{10}$ — безразмерный параметр системы, а $\xi = 10^{-12} \text{ J/m} \cdot \text{K}$ — термомеханическая постоянная, экспериментально полученная в работе [10]. Следует отметить, что здесь и далее под переменной z будем понимать \bar{z} . В случае несжимаемого НЖК безразмерное уравнение Навье–Стокса сводится к двум уравнениям [2,5]:

$$\delta_2 \partial_\tau u(\tau, z) = \partial_z \sigma_{zx}, \quad (2)$$

$$P_z(\tau, z) + \frac{\partial \mathcal{R}(\tau, z)}{\partial \theta_\tau} \theta_z = 0, \quad (3)$$

где $\partial_\tau = \partial/\partial \tau$, $P(\tau, z)$ — безразмерное сжимающее гидростатическое давление в ГЖК-ячейке, которое состоит из двух вкладов: вязкого вклада, определяемого величиной $\int_0^z \frac{\partial \mathcal{R}(\tau, z)}{\partial \theta_\tau} \theta_z dz$, и упругого вклада, определяемого потенциалом Франка $\frac{1}{2}\mathcal{G}(\theta)\theta_z^2$; $\sigma_{zx} = (d^2/K_{10})\bar{\sigma}_{zx}$ — безразмерное сдвиговое напряжение, а $\delta_2 = \rho_m K_{10}/\gamma_{10}^2$ — второй параметр системы, где ρ_m — плотность ЖК-фазы. Следует отметить, что правая часть уравнения (2) представляет собой результирующую варьирования диссипационной функции Рэлея $\mathcal{R}(\tau, z)$ по градиенту скорости u_z . В предлагаемой нами модели безразмерная диссипационная функция Рэлея $\mathcal{R}(\tau, z) = (\gamma_{10}d^4/K_{10}^2)\mathcal{R}(t, z)$ состоит из трех вкладов: вязкого $\mathcal{R}_{\text{vis}}(\tau, z)$, термомеханического $\mathcal{R}_{\text{tm}}(\tau, z)$ и теплового $\mathcal{R}_{\text{th}}(\tau, z)$. Таким образом, полное выражение

для безразмерной диссипационной функции принимает вид $\mathcal{R}(\tau, z) = \mathcal{R}_{\text{vis}}(\tau, z) + \delta_1 \mathcal{R}_{\text{lm}}(\tau, z) + \delta_3 \mathcal{R}_{\text{th}}(\tau, z)$, где $\mathcal{R}_{\text{vis}}(\tau, z) = \frac{1}{2} h(\theta) u_z^2 - \mathcal{A}(\theta) \theta_\tau u_z + \frac{1}{2} \bar{\gamma}_1(\chi) \theta_\tau^2$, $\mathcal{R}_{\text{lm}} = \theta_\tau \theta_z \chi_z (1/2 + \sin^2 \theta) - \theta_z u_z \chi_z \sin^2 \theta (1 + \frac{1}{2} \sin^2 \theta)$ и $\mathcal{R}_{\text{th}}(\tau, z) = \frac{\chi_z^2}{\chi} (\Lambda \cos^2 \theta + \sin^2 \theta)$. Здесь $h(\theta) = (\alpha_1(\chi) \times \sin^2 \theta \cos^2 \theta - \frac{1}{2} \mathcal{A}(\theta) + \frac{1}{2} \alpha_4(\chi) + g(\theta)) / \gamma_{10}$ и $g(\theta) = \frac{1}{2} (\alpha_2(\chi) \cos^2 \theta - \alpha_3(\chi) \sin^2 \theta) / \gamma_{10}$ — безразмерные гидродинамические функции, $\alpha_i(\chi) (i = 1, \dots, 6)$ — зависящие от температуры коэффициенты Лесли, $\Lambda = \Lambda_{\parallel} / \Lambda_{\perp}$, Λ_{\parallel} и Λ_{\perp} — коэффициенты теплопроводности вдоль и поперек направления директора, $\delta_3 = T_M \lambda_{\perp} \gamma_{10} d^2 / K_{10}^2$ — безразмерный параметр системы. В предполагаемой геометрии ячейки полная безразмерная сдвиговая компонента напряжений включает только вязкую часть и имеет вид [2,5]

$$\sigma_{zx}(\tau, z) = \frac{\partial \mathcal{R}(\tau, z)}{\partial u_z} = h(\theta) u_z - \mathcal{A}(\theta) \theta_\tau - \delta_1 \chi_z \theta_z \sin^2 \theta \left(1 + \frac{1}{2} \sin^2 \theta \right). \quad (4)$$

Поскольку в нашем случае мы имеем дело с малыми градиентами температуры $|\nabla T| (\sim 0.1 \text{ K}/\mu\text{m})$, можно ожидать, что температурное поле $\chi(\tau, z)$ удовлетворяет безразмерному уравнению теплопроводности [16]

$$\delta_4 \partial_\tau \chi(\tau, z) = -q_z, \quad (5)$$

где $q = -\chi \frac{\partial \mathcal{R}(\tau, z)}{\partial \chi_z}$ — проекция потока тепла поперек слоя, а $\delta_4 = \rho_m C_p K_{10} / (\gamma_{10} \lambda_{\perp})$ — еще один параметр системы. С учетом выражения для полной безразмерной диссипационной функции Рэля $\mathcal{R}(\tau, z)$ последнее уравнение может быть переписано в виде

$$\delta_4 \partial_\tau \chi(\tau, z) = \left[\chi_z (\Lambda \cos^2 \theta + \sin^2 \theta) + \delta_5 \chi \theta_z \times \left(\theta_\tau (1/2 + \sin^2 \theta) - u_z \sin^2 \theta \left(1 + \frac{1}{2} \sin^2 \theta \right) \right) \right]_z, \quad (6)$$

где $\delta_5 = \delta_1 / \delta_3$.

Для решения системы нелинейных дифференциальных уравнений в частных производных (1)–(3), (5) нам необходимы начальные и граничные условия как для полярного угла θ , так и для скорости u . Для этого рассмотрим вначале случай жесткого сцепления ЖК-молекул с обеими ограничивающими поверхностями. Предположим, что на верхней ограничивающей поверхности реализуется планарная, а на нижней — гомеотропная ориентации директора. Это позволяет записать граничные условия для полярного угла θ в виде

$$\theta(z)_{z=0} = 0, \quad \theta(z)_{z=1} = \frac{\pi}{2}; \quad (7)$$

начальное условие выберем в виде $\theta(0, z) = \frac{\pi}{2}$ ($0 < z < 1$) и позволим системе релаксировать к равновесному распределению $\theta_{\text{eq}}(z)$ по всему сечению ГЖК-ячейки. Граничные условия для скорости в случае отсутствия скольжения на ограничивающих поверхностях

принимают вид

$$u(z)_{z=0} = u(z)_{z=1} = 0. \quad (8)$$

С другой стороны, когда на верхней ограничивающей поверхности реализуется случай мягкого сцепления ЖК-молекул с твердой стенкой, энергия сцепления ЖК-молекул может быть записана в форме Рапины [7] $W = \frac{1}{2} A \sin^2 \Delta\theta$, где $\Delta\theta = \theta_s - \theta_0$, а θ_s и θ_0 — полярные углы ориентации директора на верхней ограничивающей поверхности при наличии и отсутствии внешних полей, A — плотность энергии сцепления. Баланс моментов, перенесенный на верхнюю поверхность, дает нам новое граничное условие, которому должна удовлетворять ориентация директора на этой поверхности:

$$\left(\mathcal{G}(\theta) \frac{\partial \theta}{\partial z} \right)_{z=1} = \frac{Ad}{2K_{30}} \sin 2\Delta\theta. \quad (9)$$

Теперь мы располагаем всем необходимым для того, чтобы исследовать релаксационные процессы, протекающие в ГЖК-ячейках под действием градиента температуры, направленного перпендикулярно ограничивающим поверхностям. Вначале проведем качественный анализ уравнений (1)–(3), (5), для этого рассчитаем значения всех параметров δ_i ($i = 1, \dots, 5$). Для нематика 8ЦБ в области температур существования нематической фазы $0.98 < \chi < 1.0$ ($306.5 < T < 313 \text{ K}$) плотность ЖК ρ_m равна 10^3 kg/m^3 , а значения экспериментальных данных для упругой постоянной K_{10} и вязкости γ_{10} составляют $K_{10} \sim 13 \text{ pN}$ [17] и $\gamma_{10} = 0.086 \text{ Pa} \cdot \text{s}$ [18] соответственно, в то время как значения A , полученные различными экспериментальными методами [19], имеют порядок $\sim 10^{-7} \text{ J/m}^2$. В дальнейшем используются зависимости шести коэффициентов Лесли в $(\text{Pa} \cdot \text{s})$ и двух упругих коэффициентов Франка $K_1(T)$ и $K_3(T)$ от температуры, приведенные в работах [18] и [17] соответственно. Значения теплоемкости [20] $C_p = 10^3 \text{ J/kg} \cdot \text{K}$ и коэффициентов теплопроводности [21] $\lambda_{\parallel} = 0.24 \text{ W/m} \cdot \text{K}$ и $\lambda_{\perp} = 0.13 \text{ W/m} \cdot \text{K}$ были получены калориметрическими методами, а значение термомеханического коэффициента [10] $\xi = 10^{-12} \text{ J/m} \cdot \text{K}$ найдено экспериментально с помощью измерения максимальной скорости течения в ГЖК-ячейке. Размер ГЖК-ячейки $d = 100 \mu\text{m}$. В случае планарной ориентации директора на верхней ограничивающей поверхности, когда оба полярных угла θ_s и θ_0 близки к $\pi/2$, значение $\Delta\theta$ мало ($\Delta\theta \sim 1 - 3^\circ$) и $\sin 2\Delta\theta \sim 2\Delta\theta$, так что комбинация $\frac{Ad}{2K_{30}} \sin 2\Delta\theta \sim 0.1$. Это позволяет нам оценить все параметры δ_i ($i = 1, \dots, 5$): $\delta_1 \sim 24$, $\delta_2 \sim 2 \cdot 10^{-6}$, $\delta_3 \sim 24 \cdot 10^{10}$, $\delta_4 \sim 6 \cdot 10^{-4}$ и $\delta_5 \sim 10^{-10}$ соответственно. С учетом малости параметра $\delta_2 \ll 1$ уравнение (2) принимает вид

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

где значение $C(\tau)$ не зависит от пространственной переменной z и будет определено исходя из граничных

условий (8). Уравнение (5) с учетом того, что $\delta_4, \delta_5 \ll 1$, сводится к квазистационарному уравнению

$$[\chi_z(\Lambda \cos^2 \theta + \sin^2 \theta)]_z = 0. \quad (11)$$

Решение уравнения (11) относительно безразмерной температуры $\chi(\tau, z)$ для случая, когда $\chi_1 \rightarrow \chi_{NA}$ ($\chi_{NA} = T_{NA}/T_{NI}$), может быть записано в виде

$$\chi(\tau, z) = \frac{\Delta\chi}{I} \int_{z_0}^z \frac{dz}{\Lambda \cos^2 \theta + \sin^2 \theta} + \chi_1, \quad (12)$$

где $I = \int_{z_0}^1 \frac{dz}{\Lambda \cos^2 \theta + \sin^2 \theta}$, $z_0 = \xi_{||}/d$ — граница раздела между нематической фазой размера $[1, z_0]$ и зарождающейся смектической фазой размера $[z_0, 0]$, $\Delta\chi = \chi_2 - \chi_1$, а χ_2 и χ_1 — безразмерные значения температуры на ограничивающих поверхностях ячейки. Перейдем теперь к описанию зарождающейся смектической фазы в том случае, когда температура нижней ограничивающей поверхности $T_1 \rightarrow T_{NA}$ ($\chi_1 \rightarrow \chi_{NA}$).

3. Уравнения баланса угловых и линейных моментов вблизи нижней ограничивающей поверхности при $T_1 \rightarrow T_{NA}$

По мере того как температура нижней ограничивающей поверхности приближается к температуре перехода T_{NA} , в результате флуктуаций зарождающегося смектического порядка возникает новый момент силы, действующий на единицу объема ЖК-фазы [12,13],

$$\mathbf{T}_{\Pi} = \left[\frac{\pi}{2} \frac{k_B T}{l^2 \xi_{||}} (u_z \tau_m) (\hat{\mathbf{n}} \cdot \hat{\mathbf{v}}) z - \mathcal{O}((u_z \tau_m)^2) \right] \cos \theta \hat{\mathbf{k}}, \quad (13)$$

где $\tau_m \sim \xi_{||}^{3/2}$ — время релаксации смектического параметра порядка, $\xi_{||} = \xi_0 \xi^{-\nu}$ — корреляционная длина параллельно направлению директора $\hat{\mathbf{n}}$, $\xi = T/T_{NA} - 1$ — безразмерная температура, $T = T(t, z)$ — температура зарождающихся *SmA*-слоев в нематической фазе, ξ_0 — базовая корреляционная длина, ν — критический индекс, $\hat{\mathbf{v}} = \mathbf{v}/|\mathbf{v}|$ — единичный вектор скорости, l — расстояние между смектическими слоями, k_B — постоянная Больцмана. Физический смысл \mathbf{T}_{Π} заключается в том, что сдвиговый поток $u(\tau, z)$ деформирует флуктуации смектического порядка. Так, если $\hat{\mathbf{n}} \parallel \hat{\mathbf{v}}$, то сдвиговый поток стремится наклонить *SmA*-слой таким образом, чтобы уменьшить расстояние между слоями. В результате ответной реакции материала на эту деформацию возникает возвратный момент \mathbf{T}_{Π} [12,13]. В тех случаях, когда $\hat{\mathbf{n}} \perp \hat{\mathbf{v}}$, сдвиговый поток не деформирует внутреннюю структуру зарождающейся смектической фазы и возвратный момент \mathbf{T}_{Π} отсутствует. Было показано [12,13], что учет возвратного момента ведет к перенормировке

некоторых материальных коэффициентов, таких как коэффициент Лесли

$$\alpha_3 = \bar{\alpha}_3 + \frac{\pi}{2} \frac{k_B T}{l^2} \frac{\tau_m}{\xi_{||}} \quad (14)$$

и коэффициент изгибной деформации Франка

$$K_3 = \bar{K}_3 + \frac{\pi \xi_0}{l^2} \frac{k_B T}{6} \xi^{-\nu}, \quad (15)$$

где $\bar{\alpha}_3$ и \bar{K}_3 — значения этих коэффициентов при температурах, далеких от T_{NA} . Из выражения (14) следует, что коэффициент Лесли имеет асимптотику $\alpha_3 \sim \xi^{-\nu/2}$, в то время как коэффициент Франка $K_3 \sim \xi^{-\nu}$. Как показали результаты рентгеноструктурного анализа, предсмектические аномалии поведения вязкоупругих коэффициентов для 8ЦБ наблюдаются при значениях температур $0 < \xi \leq 10^{-3}$ или $306.5 < T < 306.7$ К [11]. Так, в интервале температур $-5 < \lg \xi < -2$ базовая корреляционная длина 8ЦБ может быть оценена как [11] $\xi_0 = 0.45$ nm, а критический индекс как $\nu = 0.67 \pm 0.03$. Принимая во внимание, что $\lim_{\xi \rightarrow 0} \frac{K_3}{\gamma_1} \sim \mathcal{O}(\xi^{-\nu/2})$, уравнение баланса моментов (1) в области $[0, \xi_{||}]$, прилегающей к нижней ограничивающей поверхности, можно записать в виде [22]

$$\cos \theta(\bar{z}) [\cos(\theta)(\bar{z}) \theta_{\bar{z}\bar{z}}(\bar{z}) - \sin \theta(\bar{z}) \theta_{\bar{z}}^2(\bar{z})] = 0, \quad (16)$$

где $\bar{z} = z/\xi_{||}$ — безразмерное расстояние от нижней ограничивающей поверхности в *SmA*-фазу. Это уравнение в случае ГЖК-ячейки имеет два решения: $\theta = \frac{\pi}{2}$ и $\theta_{\text{eq}}(\bar{z}) = \arcsin(C_1 \bar{z} + C_2)$, где C_1 и C_2 — константы. Таким образом, асимптотическое выражение для полярного угла $\theta_{\text{eq}}(\bar{z})$ в зарождающейся *SmA*-фазе размером $[0, \xi_{||}]$ вблизи нижней ограничивающей поверхности может быть записано в виде

$$\theta_{\text{eq}}(z) = \arcsin(z/z_0), \quad (17)$$

где $z \in [0, z_0]$, $z_0 = \xi_{||}/d$ — граница раздела между нематической фазой размером $[1, z_0]$ и зарождающейся смектической фазой размером $[z_0, 0]$, а безразмерное расстояние от нижней ограничивающей поверхности в смектическую фазу дано в единицах $z = z/d$. Здесь для простоты выбраны значения констант $C_1 = 1$ и $C_2 = 0$. Для этих же значений $z \in [0, z_0]$ уравнение Навье–Стокса (2) принимает вид

$$\frac{1}{2} \sin^2 \theta_{\text{eq}}(z) u_z = C(\tau). \quad (18)$$

Последнее уравнение с учетом (17) имеет решение в виде

$$u(z) = -2z_0^2 \frac{C(\tau)}{z}. \quad (19)$$

Предельное значение полярного угла $\lim_{z \rightarrow z_0} \theta_{\text{eq}}(z)$, согласно условию (17), равно $\frac{\pi}{2}$, в то время как пре-

дельное значение скорости, согласно условию (18), $\lim_{z \rightarrow z_0} u(z) = -2z_0 C(\tau)$. Таким образом, граничные условия для описания процесса релаксации поля директора в случае $T_1 \rightarrow T_{NA}$ принимают вид

$$\theta(z)_{z=1, z_0} = \frac{\pi}{2}, \quad (20)$$

$$u(z)_{z=1} = 0, \quad u(z)_{z=z_0} = -2z_0 C(\tau). \quad (21)$$

Последнее условие для скорости означает, что на нижней границе ($z = z_0$) должно выполняться условие проскальзывания. Следует отметить, что функция $C(\tau)$ может быть определена из уравнения (10) и условий (21).

4. Исследование ориентационной релаксации в ГЖК-ячейке при $T_1 \rightarrow T_{NA}$

В случае, когда температура нижней ограничивающей поверхности $T_1 \rightarrow T_{NA}$, релаксация поля директора $\hat{n}(\tau, z)$, а также поля скорости $u(\tau, z)$ и температуры $\chi(\tau, z)$ к их равновесным распределениям по сечению ГЖК-ячейки может быть описана посредством решения системы безразмерных нелинейных дифференциальных уравнений в частных производных (1), (10) и (12) совместно с граничными условиями (20), (21) с помощью метода релаксации [23]. Для случая нематика 8ЦБ максимальный интервал существования нематической фазы равен $[0.98, 1.0]$ или $[306.5, 313 \text{ К}]$. Рассмотрим случай, когда температура нижней ограничивающей поверхности $T_1 = 306.7 \text{ К}$ или $\chi_1 \sim 0.981$. Размер зарождающейся SmA -фазы, соответствующий этой температуре, равен $z_0 = \xi_{||}/d \sim 4 \cdot 10^{-4}$. На рис. 1, *a-c* представлены результаты расчета эволюции угла $\theta(\tau, z)$ к его равновесному распределению $\theta_{eq}(z)$ по сечению ГЖК-ячейки с шагом по времени $\tau_k = \frac{k}{6} \tau_R(\Delta\chi)$ ($k = 1, \dots, 6$) для трех значений $\Delta\chi$: 0.01 ($\Delta T \sim 4 \text{ К}$) ($\tau_R = 0.3$); 0.005 ($\Delta T \sim 1.9 \text{ К}$) ($\tau_R = 0.6$) и 0.015 ($\Delta T \sim 6 \text{ К}$) ($\tau_R = 0.12$) соответственно. Здесь τ_R означает время релаксации системы, при этом каждому перепаду температуры $\Delta\chi$ соответствует свое время релаксации $\tau_R(\Delta\chi)$. В рассматриваемом случае образец нематика 8ЦБ прогревался сверху ($\chi_2 > \chi_1$), а критерием сходимости итерационной процедуры была выбрана величина $\varepsilon = |(\theta_{(m+1)}(\tau, z) - \theta_{(m)}(\tau, z))/\theta_{(m)}(\tau, z)| \sim 10^{-4}$. Здесь m — номер итерации. Результаты расчета эволюции поля скорости $u(\tau, z)$ к его равновесному распределению $u_{eq}(z)$ по сечению ГЖК-ячейки представлены на рис. 2. Обозначения на рис. 2 те же, что на рис. 1. Процесс релаксации поля скорости к его равновесному распределению по сечению ГЖК-ячейки характеризуется монотонным убыванием $|u(\tau, z)|$ с ростом безразмерного времени τ для трех температурных режимов $\Delta\chi = 0.01, 0.005$ и 0.015 . При этом значения времени релаксации поля скорости $\tau_R(\Delta\chi)$ те же, что и для поля директора. Максимальное значение безразмерной

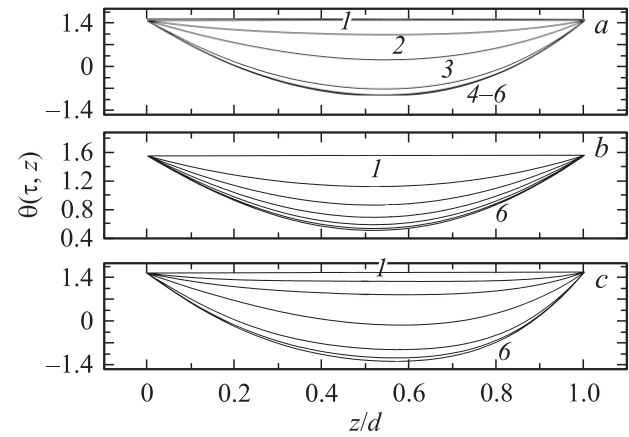


Рис. 1. Релаксация полярного угла $\theta(\tau, z)$ в (rad) к его равновесному распределению $\theta_{eq}(z)$ по сечению ГЖК-ячейки. Кривые 1–6 — решения уравнений (1), (10) и (12) с граничными условиями (20) и (21) для значений $\Delta\chi = 0.01$ (a), 0.005 (b) и 0.015 (c), отвечающие моментам времени $\tau(k) = \frac{k}{6} \tau_R(\Delta\chi)$, где $k = 1, \dots, 6$; $\tau_R(0.01) = 0.3$, $\tau_R(0.005) = 0.6$ и $\tau_R(0.015) = 0.12$ — соответствующие времена релаксации.

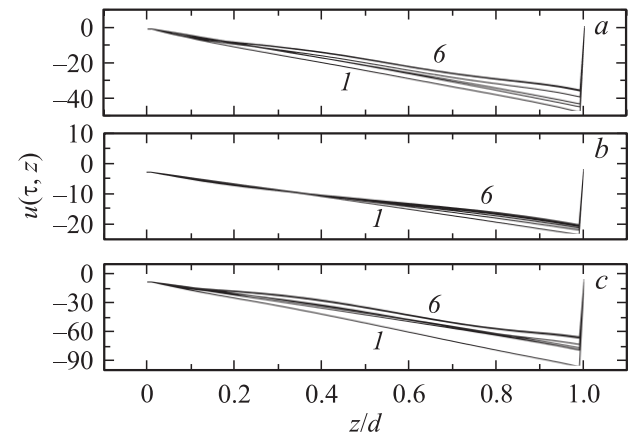


Рис. 2. Эволюция поля скорости $u(\tau, z)$ к его равновесному распределению $u_{eq}(z)$ по сечению ГЖК-ячейки. Обозначения те же, что на рис. 1.

скорости $u_{eq}(z) = \frac{\gamma_{10} d}{K_{10}} v_x^{eq}(z)$ в ГЖК-ячейке с $T_1 \sim 0.981$ ($\sim 306.7 \text{ К}$) равно ~ 35 ($\sim 53 \mu\text{m/s}$) при $\Delta\chi = 0.01$ (a), ~ 17 ($\sim 26 \mu\text{m/s}$) при $\Delta\chi = 0.005$ (b) и ~ 60 ($\sim 91 \mu\text{m/s}$) при $\Delta\chi = 0.015$ (c). Эволюция поля температуры $\chi(\tau, z)$ к его равновесному распределению по сечению ГЖК-ячейки для трех температурных режимов $\Delta\chi = 0.01$ (a), 0.005 (b) и 0.015 (c) представлена на рис. 3 и характеризуется практически линейным убыванием поля $\chi(\tau, z)$ от значения χ_2 на верхней границе $z = 1$ до значения χ_1 на нижней границе $z = z_0$. Результаты расчетов показали, что градиент температуры, направленный снизу вверх, генерирует стационарный поток в отрицательном направлении. Влияние этого градиента температуры на распределение поля директора столь велико, что при $\Delta\chi = 0.015$ ($\sim 6 \text{ К}$) в центральной части ГЖК-ячейки

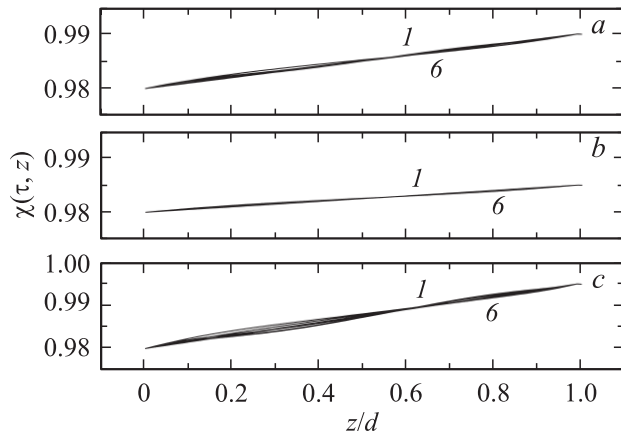


Рис. 3. Эволюция поля температуры $\chi(\tau, z)$ к его равновесному распределению $\chi_{eq}(z)$ по сечению ГЖК-ячейки. Обозначения те же, что на рис. 1.

направление поля директора противоположно направлению поля директора вблизи границ. При этом время релаксации $\tau_R(\Delta\chi)$ убывает с ростом $\Delta\chi$. Так, при $\Delta\chi = 0.005$ (~ 1.9 К) время релаксации $\tau_R(0.005) = 0.6$ (~ 36 s), тогда как при $\Delta\chi = 0.015$ (~ 6 К) время релаксации в 5 раз меньше и равно $\tau_R(0.015) = 0.12$ (~ 7 s) как для случая релаксации поля директора, так и для

случая релаксации поля скорости. В случае слабого сцепления ЖК-молекул с более теплой ограничивающей поверхностью характер релаксации безразмерного поля скорости качественно остается прежним и характеризуется острым экстремумом вблизи верхней ограничивающей поверхности. Так, в том случае, когда $\frac{Ad}{K_{30}} \Delta\theta = 0.1$, максимальное значение $|u_{eq}^{max}(z)| \sim 56.7$ ($\sim 85.5 \mu\text{m/s}$), а время релаксации $\tau_R \sim 0.15$ (~ 9 s), в то время как в случае жесткого сцепления ЖК-молекул с верхней ограничивающей поверхностью максимальное значение $|u_{eq}^{max}(z)| \sim 57.3$ ($\sim 87 \mu\text{m/s}$), а время релаксации $\tau_R \sim 0.12$ (~ 7 s). Такое поведение равновесного распределения $u_{eq}(z)$ вблизи верхней ограничивающей поверхности позволяет нам утверждать, что характер сцепления ЖК-молекул с ограничивающей поверхностью практически не влияет на характер и величину времени релаксации поля скорости.

5. Ориентационная релаксация компонент тензора напряжений при $T_1 \rightarrow T_{NA}$

Обратимся теперь к проблеме релаксации компонент тензора напряжений σ_{ij} , которые можно получить непосредственно, исходя из полной функции Рэлея

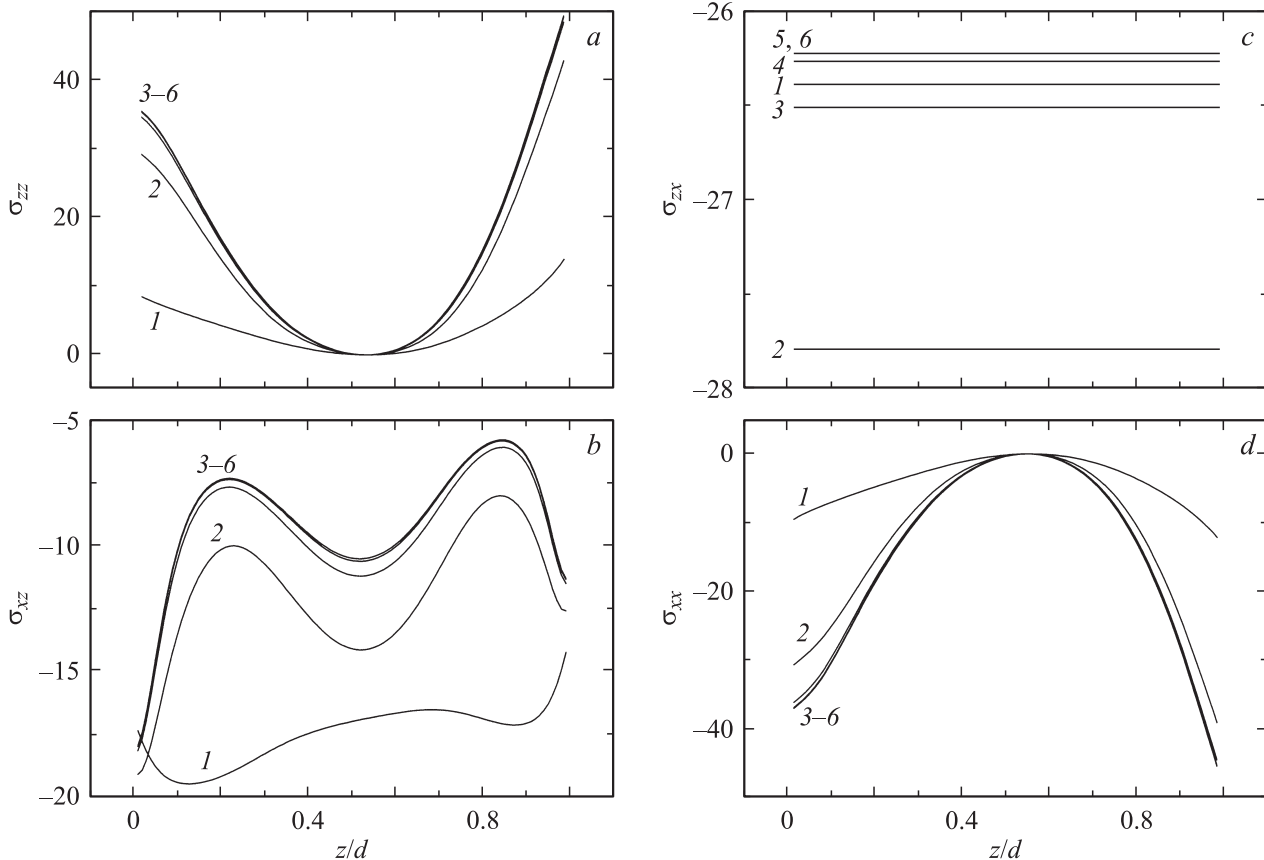


Рис. 4. Релаксация компонент тензора напряжений $\sigma_{zz}(\tau, z)$ (a), $\sigma_{xz}(\tau, z)$ (b), $\sigma_{zx}(\tau, z)$ (c) и $\sigma_{xx}(\tau, z)$ (d) к их равновесным распределениям по сечению ГЖК-ячейки. Обозначения те же, что на рис. 1. $\Delta\chi = 0.01$.

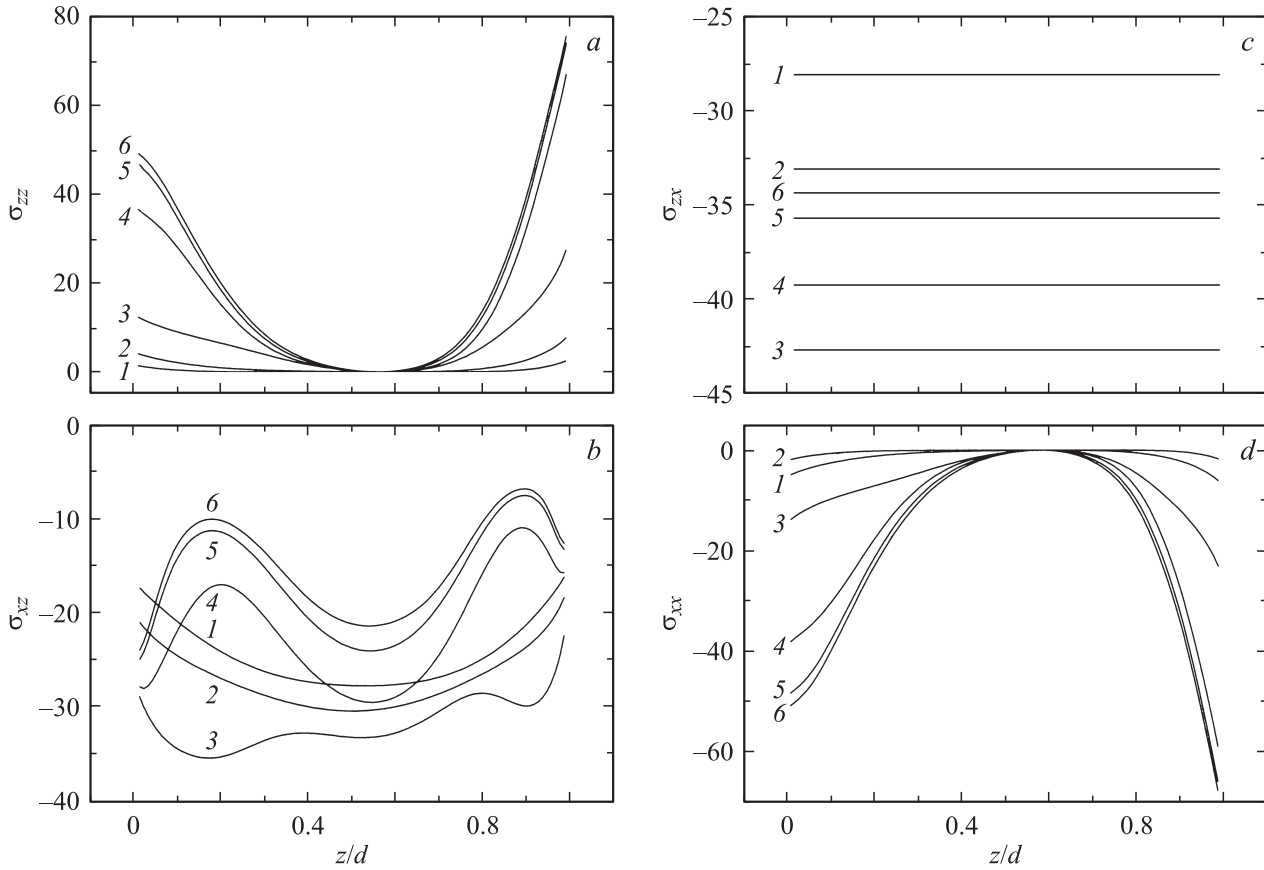


Рис. 5. То же, что и на рис. 4, при значениях $\Delta\chi = 0.015$.

$\mathcal{R}(t, z) = \left(\frac{K_{10}^2}{\gamma_{10} d^4}\right) \mathcal{R}(\tau, z)$ как [2,5,24]

$$\sigma_{zx}(\tau, z) = \frac{\partial \mathcal{R}(\tau, z)}{\partial u_z}. \quad (22)$$

Располагая значениями σ_{zx} и используя соотношение $\sigma_{zx}(\tau, z) - \sigma_{xz}(\tau, z) = \frac{\partial \mathcal{R}(\tau, z)}{\partial \theta_r}$, можем рассчитать

$$\sigma_{xz}(\tau, z) = \sigma_{zx}(\tau, z) - (\mathcal{G}(\theta)\theta_z)_z + \frac{1}{2} \mathcal{G}(\theta)\theta_z^2. \quad (23)$$

В случае плоской геометрии выражение баланса линейных моментов (3) позволяет нам рассчитать компоненты нормальных напряжений тензора σ_{ii} ($i = x, z$)

$$\sigma_{xx}(\tau, z) = -P(\tau, z), \quad (24)$$

$$\sigma_{zz}(\tau, z) = -P(\tau, z) - \mathcal{G}(\theta)\theta_z^2, \quad (25)$$

где $P(\tau, z) = \frac{d^2}{K_{10}} \bar{P}(t, z)$ — безразмерное гидростатическое давление в системе. Результаты расчета компонент тензора напряжений $\sigma_{zz}(\tau, z)$, $\sigma_{xz}(\tau, z)$, $\sigma_{zx}(\tau, z)$ и $\sigma_{xx}(\tau, z)$ по сечению ГЖК-ячейки от более холодной нижней границы $z = z_0$ к более теплой верхней границе $z = 1$ для случая двух температурных режимов $\Delta\chi = 0.01$ и 0.015 представлены на рис. 4 и 5 соответственно. На рис. 4 показана эволюция $\sigma_{zz}(\tau, z)$ (a), $\sigma_{xz}(\tau, z)$ (b), $\sigma_{zx}(\tau, z)$ (c) и $\sigma_{xx}(\tau, z)$ (d) в зависимости от z/d для различных моментов вре-

мени $\tau(k) = \left(\frac{k}{6}\right)\tau_R$, где $K = 1, \dots, 6$, при этом время релаксации $\tau_R = \tau(6) = 0.12$ (~ 7 s). Равновесное распределение значений нормальных компонент $\sigma_{zz}(z)$ и $\sigma_{xx}(z)$ характеризуется острыми экстремумами вблизи ограничивающих поверхностей $z = 1$ и $z = z_0$ и $|\sigma_{ii}(z)| \rightarrow 0$ в центре ГЖК-ячейки. Равновесное распределение тангенциальной компоненты $\sigma_{xz}(z)$ характеризуется осцилляционным поведением отрицательных значений $\sigma_{xz}(z)$ с ростом z/d , в то время как функция $\sigma_{zx}(z)$, согласно уравнению (10), постоянна по всему сечению ГЖК-ячейки. В данном случае с ростом $\Delta\chi$ от значения 0.01 (~ 4 K) до 0.015 (~ 6 K) абсолютная величина компонент тензора напряжений $|\sigma_{ii}(z)|$ в среднем возрастает на 25%. При этом максимальное значение размерной величины тензора напряжений $\bar{\sigma}_{ij} = \left(\frac{K_{10}}{d^2}\right)\sigma_{ij}$ на заключительной стадии эволюционного процесса ~ 0.09 Pa достигается для случая нормальной компоненты $\bar{\sigma}_{zz}$ вблизи более теплой ограничивающей поверхности $z = 1$. Располагая значениями как компонент тензора напряжений $\sigma_{ij}(\tau, z)$, так и поля скорости $u(\tau, z)$, мы можем рассчитать значения сдвиговой (η_s) и нормальной (η_c) вязкостей в ГЖК-ячейках:

$$\eta_s = \sigma_{zx}(\tau, z)/u_z, \quad (26)$$

$$\eta_c = \sigma_{xx}(\tau, z)/u_z. \quad (27)$$

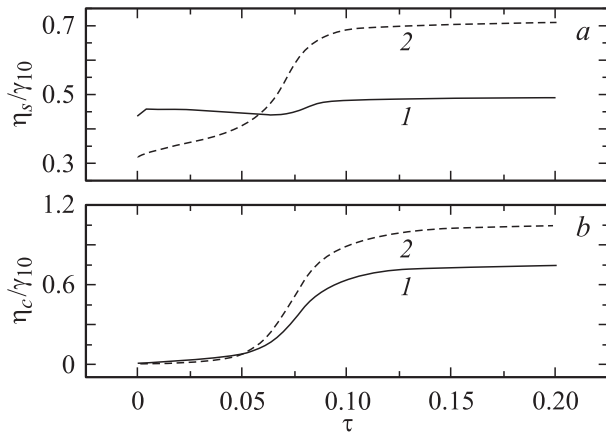


Рис. 6. Релаксация сдвиговой $\eta_s(\tau, z)/\gamma_{10}$ (a) и сжимающей $\eta_c(\tau, z)/\gamma_{10}$ (b) вязкостей к их равновесным значениям в двух точках ГЖК-ячейки $z/d = 0.04$ (1) и 0.96 (2). Значения $\Delta\chi = 0.015$.

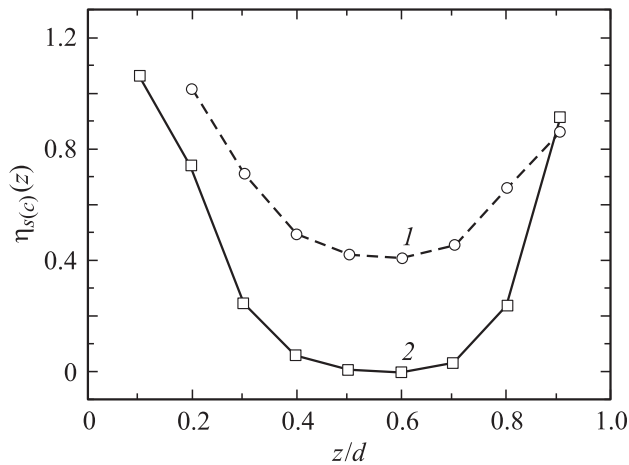


Рис. 7. Распределение равновесных сдвиговой $\eta_s(z)$ (1) и сжимающей $\eta_c(z)$ (2) вязкостей по сечению ГЖК-ячейки. Значение $\Delta\chi = 0.015$.

Характер релаксации этих безразмерных коэффициентов вязкости к их равновесным значениям для двух расстояний $z/d = 0.04$ (вблизи нижней границы) и 0.96 (вблизи верхней границы) представлен на рис. 6, а их равновесное распределение по сечению ГЖК-ячейки показано на рис. 7. Результаты расчета релаксации коэффициентов вязкости $\eta_s(\tau, z)$ (рис. 6, a) и $\eta_c(\tau, z)$ (рис. 6, b) к их равновесным значениям $\eta_{s(c)}$ показали, что время релаксации τ_R этих материальных коэффициентов совпадает со временем релаксации как поля директора, так и поля скорости. При этом время релаксации $\tau_R(\Delta\chi)$ убывает с ростом $\Delta\chi$. Так, с ростом $\Delta\chi$ от 0.01 до 0.015 величина $\tau_R(\Delta\chi)$ убывает от 0.3 (~ 18 s) до 0.12 (~ 7 s) соответственно. Отметим, что в центре ГЖК-ячейки значения сдвиговой вязкости η_s в 2 раза меньше, чем на краях ячейки ($\eta_s(0.5)/\eta_s(0.1) = 0.5$), в то время как величина η_c в центре ячейки практически на два порядка меньше по сравнению с η_c вблизи краев ячейки

($\eta_c(0.5)/\eta_c(0.1) = 10^{-2}$). Такое поведение равновесного распределения вязкости η_c указывает на то, что нормальная компонента тензора напряжения σ_{xx} сильно влияет как на характер релаксации, так и на равновесное распределение $\eta_c(z)$ по сечению ГЖК-ячейки.

6. Заключение

Предыдущие исследования ориентационных процессов релаксации в цианобифенилах, таких как 5ЦБ [2,5], которые образуют нематическую фазу при температурах, близких к комнатным, показали, что градиент температуры, направленный вертикально к границам ГЖК-ячейки, инициирует гидродинамическое течение ЖК в горизонтальном направлении. На величину и направление течения ЖК-фазы влияют как направление градиента температуры, так и характер сцепления ЖК-молекул с ограничивающими поверхностями. При этом температурный режим на обеих поверхностях соответствовал температурному интервалу существования ЖК-фазы 5ЦБ. В случае другого цианобифенильного соединения, такого как 8ЦБ, которое обнаруживает фазовый переход нематик–смектик А, по мере охлаждения одной из ограничивающих поверхностей, например нижней, по направлению к температуре, соответствующей T_{NA} , релаксационный процесс, обусловленный градиентом температуры, обнаруживает ряд особенностей. Эти особенности вызваны формированием новой SmA -фазы по мере того как $T_1 \rightarrow T_{NA}$. На макроскопическом уровне описания это проявляется в аномальном росте величин ряда материальных коэффициентов, таких как вращательная вязкость и изгибная деформация Франка, что в конечном итоге сказывается на характере баланса как линейных, так и вращательных моментов, действующих на единицу объема ЖК-фазы в пристенном слое. Все это ведет к тому, что граничные условия, которым должны удовлетворять полярный угол и скорость, существенно изменяются. Так, гибридная ориентация для полярного угла θ (7) заменяется условием (20), соответствующим планарной ориентации полярного угла на обеих границах, а условие отсутствия скольжения на ограничивающих поверхностях заменяется условием (21). Это условие подразумевает, что на нижней ограничивающей поверхности $z = z_0$ (там, где формируется смектическая фаза) должно выполняться условие проскальзывания, а величина скорости на этой границе пропорциональна размеру новой SmA -фазы. Поскольку размер этой SmA -фазы очень мал (~ 40 nm при $T_1 \sim 306.7$ K), величина скорости $u(z)_{z=z_0} = -2z_0 C(\tau)$ на границе раздела $N-SmA$ также мала относительно скорости в объеме ГЖК-ячейки. Но даже такое незначительное изменение граничного условия для скорости ведет к кардинальному изменению релаксационного процесса поля скорости $u(\tau, z)$. В 8ЦБ гидродинамический равновесный поток $u(z)$ направлен в отрицательном направлении и характеризуется острым минимумом вблизи более теплой верхней ограничивающей поверхности (рис. 2), в то время

как для 5ЦБ при том же направлении и величине градиента температуры гидродинамический равновесный поток $u(z)$ направлен в положительном направлении и характеризуется острым максимумом вблизи более теплой ограничивающей поверхности (рис. 1 в [5]). Качественно меняется и характер релаксации компонент тензора напряжений σ_{ij} . Для примера можно сравнить рис. 4 работы [5] и рис. 4 настоящей работы. Все это свидетельствует о том, что флуктуации локального смектического порядка сильно влияют не только на статические параметры ЖК-системы, такие как коэффициенты упругости Франка, но и на релаксационные процессы в ЖК-системе, обусловленные градиентом температуры. Таким образом, мы надеемся, что настоящая работа дает ответы на некоторые вопросы, связанные с описанием релаксационных процессов, протекающих в ГЖК-ячейках в случае, когда температура одной из ограничивающих поверхностей $T_1 \rightarrow T_{NA}$.

Список литературы

- [1] D.O. Krimer, S. Residori. *Eur. Phys. J. E* **23**, 77 (2007).
- [2] A.V. Zakharov, A.A. Vakulenko. *J. Chem. Phys.* **127**, 084 907 (2007).
- [3] A. Dequidt, P. Oswald. *Eur. Phys. Lett.* **80**, 26 001 (2007).
- [4] A. Dequidt, P. Oswald. *Eur. Phys. J. E* **24**, 157 (2007).
- [5] А.В. Захаров, А.А. Вакуленко. *ФГТ* **50**, 557 (2008).
- [6] O. Lehmann. *Ann. Phys.* **4**, 649 (1900).
- [7] P.G. de Gennes, J. Prost. *The physics of liquid crystals*. Oxford University Press, Oxford (1995). 349 p.
- [8] F.M. Leslie. *Proc. R. Soc. London. Ser. A* **307**, 359 (1968).
- [9] P.C. Акопян, Б.Я. Зельдович. *ЖЭТФ* **87**, 1660 (1984).
- [10] R.S. Akopyan, R.B. Alaverdian, E.A. Santrosian, Y.S. Chilingarian. *J. Appl. Phys.* **90**, 3371 (2001).
- [11] D. Davidov, C.A. Safinia, M. Kaplan, S.S. Dana, R. Schaet Zing, R.J. Birgeneau, J.D. Lister. *Phys. Rev. B* **19**, 1657 (1979).
- [12] R.F. Bruinsma, C.A. Safinia. *Phys. Rev. A* **43**, 5377 (1991).
- [13] A.V. Zakharov, J. Thoen. *Phys. Rev. E* **69**, 051 709 (2004).
- [14] J.L. Ericksen. *Arch. Ration. Mech. Anal.* **4**, 231 (1960).
- [15] F.M. Leslie. *Arch. Ration. Mech. Anal.* **28**, 265 (1968).
- [16] Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. *Гидродинамика*. Наука, М. (1988). 733 с.
- [17] N.V. Madhusudana, R.P. Pratibha. *Mol. Cryst. Liq. Cryst.* **89**, 249 (1982).
- [18] A.G. Chmielewski. *Mol. Cryst. Liq. Cryst.* **132**, 339 (1986).
- [19] L.M. Blinov, A.Yu. Kabaenkov, A.A. Sonin. *Liq. Cryst.* **5**, 645 (1989).
- [20] P. Jamee, G. Pitsi, J. Thoen. *Phys. Rev. E* **66**, 021 707 (2002).
- [21] M. Marinelli, A.K. Ghosh, F. Mercuri. *Phys. Rev. E* **63**, 061 713 (2001).
- [22] A.V. Zakharov, A.A. Vakulenko, J. Thoen. *J. Chem. Phys.* **118**, 4253 (2003).
- [23] И.С. Березин, Н.Р. Жидков. *Методы вычислений*. Физматгиз, М. (1964). 464 с.
- [24] I.W. Stewart. *The static and dynamic continuum theory of liquid crystals*. Taylor and Francis, London (2004). 345 p.