

## Формирование локальных течений в тонких нематических каналах со свободной поверхностью под воздействием лазерного излучения

© А.В. Захаров, А.А. Вакуленко

Институт проблем машиноведения РАН,  
Санкт-Петербург, Россия

E-mail: avak2vale@mail.ru

(Поступила в Редакцию 21 января 2015 г.)

Предложено теоретическое описание процесса формирования гидродинамических течений в узких жидкокристаллических каналах со свободной поверхностью под действием лазерного излучения. В рамках нелинейного обобщения классической теории Эриксона–Лесли учтены термомеханические вклады как в тензор напряжений, так и в вязкий момент, действующие на единицу объема жидкокристаллической фазы, что позволило описать некоторые особенности формирования течения в нематиках, образованных молекулами 4-н-пентил-4'- и 4-н-октил-4 цианофенилов.

### 1. Введение

Жидкокристаллические (ЖК) материалы широко используются не только в оптоэлектронике, но и в медицине и биологии при создании различных сенсоров, термоиндикаторов и детекторов давления [1]. Основным элементом таких сенсоров и датчиков являются микро- и нано литровые объемы ЖК материалов, инкапсулированные в открытые узкие каналы, в которых свободная поверхность служит эффективным манипулятором как структурных, так и оптических свойств этих приборов [2]. На процессы переориентации и формирования течений в узких ЖК каналах под действием внешних сил сильно влияет характер пристенного взаимодействия ЖК молекул с ограничивающими поверхностями. В свою очередь, наличие свободной поверхности на границе раздела ЖК фаза/вакуум или воздух влияет на характер переориентации поля директора и формирование гидродинамических потоков в таких ЖК системах под действием внешних сил, например, таких как сфокусированное лазерное излучение. Так, результаты исследования светогидродинамической переориентации поля директора в миллиметровых нематических каналах показали важность учета конвективных течений типа Рэлея–Бенара и Марангони [3–4]. В то же время было показано, что, когда воздействие лазерного излучения на микролитровую ЖК ячейку характеризуется малым изменением распределения поля директора, тогда гидродинамическое течение отсутствует [5]. С другой стороны, недавние исследования влияния градиента температуры на характер возникающих гидродинамических течений в тонких микролитровых ЖК ячейках показали важность учета термомеханических вкладов в тензор напряжений и вязкий момент, действующих на единицу объема ЖК фазы [6]. В этой работе было показано, что основным физическим механизмом, ответственным за возникновение гидродинамических потоков является

взаимодействие градиентов поля директора и температуры. В этой работе градиент поля директора формировался посредством гибридной ориентации ЖК фазы на ограничивающих поверхностях. В случае ЖК фазы со свободной поверхностью на границе раздела ЖК фаза/вакуум или воздух всегда формируется гомеотропная ориентация молекул, образующих ЖК фазу [7]. Таким образом гибридная ориентация поля директора внутри ЖК канала может быть достигнута посредством планарной ориентации молекул ЖК фазы вдоль ограничивающих поверхностей, что способствует формированию градиента поля директора.

Целью нашего исследования является описание эволюции полей директора  $\hat{n}(t, \mathbf{r})$  и скорости  $\mathbf{v}(t, \mathbf{r})$  в микрометровом ЖК канале со свободной поверхностью под действием градиента температуры  $\nabla T(t, \mathbf{r})$ , инициируемого лазерным излучением. С этой целью в рамках классической теории Эриксона–Лесли [8,9] будут учтены балансы массы, импульсов, угловых моментов и энтропии [10] с учетом термомеханического вклада в диссипационную функцию [11]. Численные исследования характера переориентации поля директора и формирования гидродинамических потоков в микрометровых ЖК каналах, образованных пентил (5ЦБ)- и октил (8ЦБ) цианофенильными молекулами будут проведены для различных режимов лазерного излучения.

### 2. Основные уравнения

Рассмотрим длинный плоский ЖК канал с размерами  $2L$  и  $2d$ , ограниченный твердыми вертикальными поверхностями и свободной поверхностью, граничащей с вакуумом. Допустим, что директор планарно ориентирован на твердых ограничивающих поверхностях и гомеотропно на свободной границе раздела ЖК фаза/вакуум, причем рассматривается случай сильного сцепления ЖК молекул с твердыми поверхностями.

В нашем случае система координат выбрана таким образом, что ось  $X$  совпадает с направлением директора на нижней горизонтальной поверхности ( $\hat{\mathbf{i}} \parallel \hat{\mathbf{n}}_{z=-d}$ ), в то время как ось  $Z$  совпадает с направлением директора на обеих вертикальных поверхностях ( $\hat{\mathbf{k}} \parallel \hat{\mathbf{n}}_{x=\pm L}$ ), а орт  $\hat{\mathbf{j}} = \hat{\mathbf{k}} \times \hat{\mathbf{i}}$ . Переориентация поля директора  $\hat{\mathbf{n}} = n_x \hat{\mathbf{i}} + n_z \hat{\mathbf{k}}$  осуществляется в плоскости  $XOZ$ . При этом верхняя, изначально горизонтальная свободная поверхность раздела ЖК фаза/вакуум под действием лазерного излучения деформируется, и эта деформация характеризуется кривизной  $\kappa$ , а также нормалью  $\hat{\mathbf{v}}$  и единичным касательным вектором  $\hat{\mathbf{t}}$ . Под действием лазерного излучения в исследуемой среде возникает градиент температуры  $\nabla T$ , который взаимодействует с градиентом поля директора  $\nabla \hat{\mathbf{n}}$ . Ранее нами было показано, что учет термомеханических вкладов как в тензор напряжений, так и в вязкий момент, действующих на единицу объема ЖК фазы, приводит к формированию гидродинамических потоков в ЖК ячейках [6]. Таким образом формирование гидродинамического течения  $\mathbf{v}(t, \mathbf{r})$  и следующая за этим переориентация поля директора  $\hat{\mathbf{n}}(t, \mathbf{r})$  под действием лазерного излучения может быть описана в рамках обобщенной теории Эриксона–Лесли [8,9], которая учитывает баланс массы, импульсов, угловых моментов и энтропии [10]. Принимая во внимание микроскопические размеры ЖК канала, мы можем предположить, что плотность ЖК системы постоянна и мы имеем дело с несжимаемой жидкостью. Это позволяет нам записать уравнения сохранения в виде [6,8,9]

$$\begin{aligned} \nabla \cdot \mathbf{v} &= 0, \\ \mathbf{T}_{\text{el}} + \mathbf{T}_{\text{vis}} + \mathbf{T}_{\text{tm}} &= 0, \\ \rho \frac{d\mathbf{v}}{dt} &= \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma}, \\ \rho C_P \frac{dT}{dt} &= -\nabla \cdot \mathbf{q} + \mathcal{O}(t, x, z), \end{aligned} \quad (1)$$

где  $\mathbf{T}_{\text{el}}$ ,  $\mathbf{T}_{\text{vis}}$  и  $\mathbf{T}_{\text{tm}}$  — упругий, вязкий и термомеханический вклады в баланс моментов, действующих на единицу объема ЖК фазы, (см. Приложение (П1), (П2) и (П3)). Здесь  $\rho$  — плотность ЖК фазы,  $\boldsymbol{\sigma} = \boldsymbol{\sigma}^{\text{el}} + \boldsymbol{\sigma}^{\text{vis}} + \boldsymbol{\sigma}^{\text{tm}} - P\mathcal{I}$  — тензор напряжений, состоящий из упругого, вязкого и термомеханического вкладов соответственно (см. Приложение (П4), (П5) и (П6)),  $P$  — гидростатическое давление в ЖК системе,  $\mathcal{I}$  — единичный тензор,  $C_P$  — теплоемкость ЖК фазы,  $\mathbf{q}$  — вектор потока тепла, компоненты которого определены выражениями (П12), и  $\mathcal{O}(t, x, z)$  — плотность внутренних источников тепла [11]. Будем предполагать, что температура на всех твердых ограничивающих поверхностях постоянна и равна

$$(T)_{-L < x < L, z = -d} = (T)_{x = \pm L, -d < z < d} = T_0, \quad (2)$$

в то время как через верхнюю свободную поверхность отсутствует поток тепла, так что граничное условие на

свободной поверхности может быть записано в виде

$$\mathbf{q}_{z=h} \cdot \hat{\mathbf{v}} = 0, \quad (3)$$

где функция  $h(t, x)$  описывает эволюцию свободной поверхности в процессе прогревания ЖК канала.

Поле скорости  $\mathbf{v}$  подчиняется условию прилипания на твердых ограничивающих поверхностях

$$\mathbf{v}_{-L < x < L, z = -d} = \mathbf{v}_{x = \pm L, -d < z < d} = 0, \quad (4)$$

в то время как условие на свободной поверхности связывает три независимых компоненты  $(u, x)_{z=h}$ ,  $(u, z)_{z=h}$  и  $(w, x)_{z=h}$  градиента поля скорости несжимаемой жидкости, где  $u, z = \frac{\partial u}{\partial z}$ . Эти компоненты определяются из условия баланса угловых моментов и сил на поверхности  $z = h$ , что позволяет нам записать эти балансы в виде

$$\begin{aligned} (\mathbf{T}_{\text{el}} + \mathbf{T}_{\text{vis}} + \mathbf{T}_{\text{tm}})_{z=h} &= 0, \\ \hat{\mathbf{v}} \cdot \boldsymbol{\sigma}_{z=h} \cdot \hat{\mathbf{v}} &= \gamma \kappa, \\ \hat{\mathbf{v}} \cdot \boldsymbol{\sigma}_{z=h} \cdot \hat{\mathbf{t}} &= 0. \end{aligned} \quad (5)$$

Здесь  $\gamma$  — коэффициент поверхностного натяжения свободной ЖК поверхности. Зная функцию  $z = h(t, x)$ , мы можем определить нормальный  $\hat{\mathbf{v}} = \left[ -\frac{h, x}{\sqrt{h, x}^2 + 1}, 1 \right]$  и касательный  $\hat{\mathbf{t}} = \left[ 1, \frac{h, x}{\sqrt{h, x}^2 + 1} \right]$  векторы к этой поверхности, а также ее кривизну  $\kappa = -\frac{h, xx}{\sqrt{h, x}^2 + 1}$  и ориентацию директора на поверхности  $\hat{\mathbf{n}}_{z=h} = -\hat{\mathbf{v}}$ .

В дальнейшем будем исследовать гидродинамические режимы, возникающие в ЖК канале микронных размеров под действием градиента температуры порядка  $\nabla T \sim 10 \text{ K}/\mu\text{m}$ . Условие несжимаемости ЖК материала  $u, x + w, z = 0$  выполняется за счет введения функции тока  $\psi$   $u = \psi, z$ ,  $w = -\psi, x$ . Система безразмерных уравнений, описывающих эволюцию поля директора, скорости и температуры под действием источника тепла может быть записана в виде

$$\begin{aligned} n_z n_{x, \tau} - n_x n_{z, \tau} &= \delta_1 [n_z \mathcal{M}_{0, x} - n_x \mathcal{M}_{0, z} + K_{31} (n_z f, z + n_x f, x)] \\ &\quad - \frac{1}{2} \psi, xx [1 + \gamma_{21} (n_x^2 - n_z^2)] - \frac{1}{2} \psi, zz [1 - \gamma_{21} (n_x^2 - n_z^2)] \\ &\quad + 2\gamma_{21} \psi, xz n_x n_z + \psi, z N_x + \psi, x N_z + \delta_2 (\chi, x L_x + \chi, z L_z) \\ \delta_3 \psi, xz \tau &= a_1 \psi, zzzz + a_2 \psi, xzzz + a_3 \psi, xxzz + a_4 \psi, xxxz \\ &\quad + a_5 \psi, xxxx + a_6 \psi, zzzz + a_7 \psi, xzzz + a_8 \psi, xxxz + a_9 \psi, xxx \\ &\quad + a_{10} \psi, zz + a_{11} \psi, xz + a_{12} \psi, xx + \mathcal{F}, \\ \chi, \tau &= [\chi, x (\Lambda n_x^2 + n_z^2) + (\Lambda - 1) n_x n_z \chi, z],_x \\ &\quad + [\chi, z (\Lambda n_z^2 + n_x^2) + (\Lambda - 1) n_x n_z \chi, x],_z \\ &\quad + \delta_4 \left( \nabla \cdot \chi \frac{\partial \mathcal{R}^{\text{tm}}}{\partial \nabla \chi} \right) + \delta_5 \mathcal{O}(\tau, x, z) - \psi, z \chi, x + \psi, x \chi, z, \end{aligned} \quad (6)$$

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

$\gamma_{21} = \frac{\gamma_2}{\gamma_1}$  — отношение коэффициентов вращательной вязкости,  $\bar{\psi} = \frac{t_T}{d^2} \psi$  — безразмерная функция тока  $\psi$ ,  $\bar{x} = x/d$ ,  $\bar{z} = z/d$  — безразмерные координаты,  $\tau = t/t_T$  — безразмерное время, а  $t_T = \frac{\rho C_P d^2}{\lambda_{\perp}}$  — характерное время используемое для нормировки. В системе уравнений (6) и в последующем изложении черта над безразмерной функцией тока и безразмерными пространственными переменными опущена. Выражения для функции  $\mathcal{F}$  и коэффициентов  $a_i$  ( $i = 1, \dots, 12$ ) даны в Приложении (П8) и (П9). В последнем уравнении системы (6)  $\Lambda = \lambda_{\parallel}/\lambda_{\perp}$  есть отношение коэффициентов теплопроводности вдоль и поперек направления директора,  $\chi = T/T_{NI}$  — безразмерная температура,  $T_{NI}$  — температура перехода нематик–изотропная жидкость,  $\chi_{,i} = \frac{\partial \chi}{\partial x_i}$ ,  $n_{i,\tau} = \frac{\partial n_i}{\partial \tau}$  ( $i = x, z$ ). Вспомогательные функции  $f$ ,  $N_x$ ,  $N_z$ ,  $L_x$  и  $L_z$  имеют вид  $f = n_{x,z} - n_{z,x}$ ,  $N_x = n_x n_{z,x} - n_z n_{x,x}$ ,  $N_z = n_z n_{x,z} - n_x n_{z,z}$ ,  $L_x = n_x n_{z,x} - \frac{3}{2} n_z n_{x,x} + \frac{1}{2} n_x n_{x,z}$ ,  $L_z = -n_z n_{x,z} + \frac{3}{2} n_x n_{z,z} - \frac{1}{2} n_z n_{z,x}$ . Система уравнений (6) характеризуется набором параметров  $\delta_1 = \frac{t_T K_1}{\gamma_1 d^2}$ ,  $\delta_2 = \frac{\rho C_P T_{NI} \xi}{\lambda_{\perp} \gamma_1}$ ,  $\delta_3 = \frac{\rho d^2}{\gamma_1 t_T}$ ,  $\delta_4 = \frac{\xi}{\lambda_{\perp} t_T}$ ,  $\delta_5 = \frac{2\alpha}{\pi \omega^2 \lambda_{\perp} T_{NI}} \mathcal{O}_0$ . Здесь  $\mathcal{O}_0$  — мощность теплового потока [11]  $\mathcal{O}(x, z) = \mathcal{O}_0 \exp \left[ -2 \frac{(x-x_0)^2 + (z-z_0)^2}{\omega^2} \right] \times \mathcal{H}(t_{in} - t)$ , где  $\mathcal{H}(t_{in} - t)$  — функция Хэвисайда,  $\omega$  — размер лазерного пятна,  $\alpha$  — коэффициент абсорбции,  $t_{in}$  — характерное время накачки лазерного излучения в ЖК канал, и  $x_0, z_0$  — координаты центра лазерного пятна.

Эволюция поля директора и скорости под действием градиента температуры  $\nabla \chi$  может быть описана системой нелинейных дифференциальных уравнений в частных производных (6) и должна быть дополнена граничными условиями для поля директора, температуры и функции тока как на твердой поверхности

$$\begin{aligned} (n_x)_{x=\pm 10, -1 \leq z \leq 1} &= 0, & (n_x)_{-10 \leq x \leq 10, z=-1} &= 1, \\ (\psi_{,x})_{x=\pm 10, -1 \leq z \leq 1} &= (\psi_{,z})_{x=\pm 10, -1 \leq z \leq 1} &= 0, \\ (\psi_{,x})_{-10 \leq x \leq 10, z=-1} &= (\psi_{,z})_{-10 \leq x \leq 10, z=-1} &= 0, \\ (\chi)_{x=\pm 10, -1 \leq z \leq 1} &= 0.97, & (\chi)_{-10 \leq x \leq 10, z=-1} &= 0.97, \end{aligned} \quad (7)$$

так и на свободной границе раздела ЖК фаза/вакуум

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{n}}_{z=h} \cdot \hat{\mathbf{v}} &= -1, \\ (\hat{\mathbf{n}} \cdot \nabla \chi)_{z=h} &= 0, \\ \hat{\mathcal{B}} \cdot \Psi &= \mathcal{C}. \end{aligned} \quad (8)$$

Последнее уравнение является результатом решения системы (5) относительно трех безразмерных компонент градиента поля скорости  $\Psi = (\psi_{,xx}, \psi_{,xz}, \psi_{,zz})$ . Выражения для компонент матрицы  $\mathcal{B}$  и вектора  $\mathcal{C}$  даны в Приложении (П10) и (П11), а начальные условия могут

быть записаны в виде

$$\begin{aligned} n_x(\tau = 0, x, z) &= n_x^{el}, & \psi(\tau = 0, x, z) &= 0, \\ \chi(\tau = 0, x, z) &= 0.97. \end{aligned} \quad (9)$$

В уравнениях (9)  $n_x^{el}$  есть распределение упругого гибридного поля директора, удовлетворяющее уравнению

$$n_z \mathcal{M}_{0,x} - n_x \mathcal{M}_{0,z} + K_{31} (n_z f_{,z} + n_x f_{,x}) = 0, \quad (10)$$

и граничным условиям  $(n_x)_{x=\pm 10, -1 \leq z \leq 1} = (n_x)_{-10 \leq x \leq 10, z=1} = 0$ ,  $(n_x)_{-10 \leq x \leq 10, z=-1} = 1$ . Решение системы (6) с граничными и начальными условиями (7)–(10) следует дополнить кинематическим условием для определения формы границы раздела ЖК фаза/вакуум

$$\frac{\partial h}{\partial t} = w_{z=h} - u_{z=h} h_{,x}. \quad (11)$$

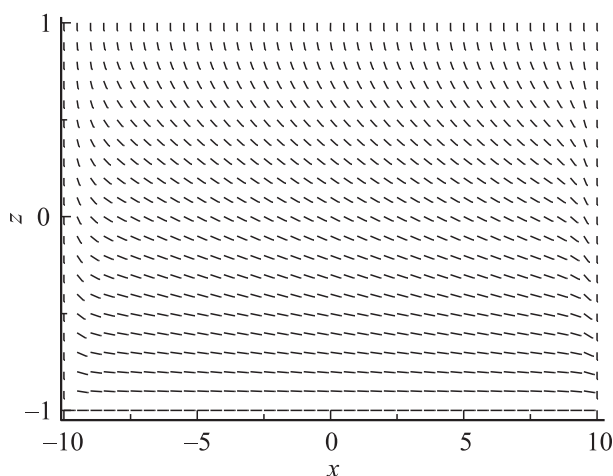
Для ЖК материалов, образованных молекулами 4-н-пентил-4'-цианобифенила (5ЦБ) и 4-н-октил-4'-цианобифенила (8ЦБ) интервалы существования нематических фаз составляют [297–308.3][K] и [306.5–313][K], соответственно [12], при этом плотность обоих ЖК материалов была выбрана  $\sim 10^3 \text{ kg/m}^3$ . Значения упругих коэффициентов Франка для этих ЖК материалов, полученные экспериментальными методами [13], оцениваются как  $K_1(5ЦБ)=10.5$ ,  $K_3(5ЦБ)=13.8$ , при  $T = 300 \text{ K}$  и  $K_1(8ЦБ)=12.8$ ,  $K_3(8ЦБ)=13.8$ , при  $T = 308 \text{ K}$  (все значения  $K_i$  даны в [pN]) соответственно в то время как значения коэффициентов вращательной вязкости  $\gamma_1$  и  $\gamma_2$  при этих же температурах оцениваются как в [14]  $\gamma_1(5ЦБ) \sim 0.072$  и  $\gamma_2(5ЦБ) \sim -0.086$  и  $\gamma_1(8ЦБ) \sim 0.0079$  и  $\gamma_2(8ЦБ) \sim -0.052$  (все значения  $\gamma_i$  даны в [Pa s]), соответственно. Значения коэффициентов Лесли в  $a_i$ , ( $i = 1, \dots, 6$ ) при этих же температурах для 5ЦБ оцениваются [14] как  $a_1 \sim -0.0066$ ,  $a_2 \sim -0.075$ ,  $a_3 \sim -0.0035$ ,  $a_4 \sim 0.072$ ,  $a_5 \sim 0.048$ , и  $a_6 \sim -0.03$ , в то время как для 8ЦБ оцениваются как  $a_1 \sim -0.0098$ ,  $a_2 \sim -0.040$ ,  $a_3 \sim -0.0017$ ,  $a_4 \sim 0.082$ ,  $a_5 \sim 0.041$ , и  $a_6 \sim -0.01$  (все значения  $a_i$  даны в [Pa s]) соответственно. Значения коэффициентов теплопроводности  $\lambda_{\perp}$  и  $\lambda_{\parallel}$  для обоих ЖК материалов были выбраны равными [15] 0.13 и 0.26 W/mK, а величина теплоемкости [16]  $C_P$  была выбрана равной  $\sim 10^3 \text{ J/kgK}$ . Принимая во внимание микрометровый размер ЖК канала, характерное время  $t_T$  используемое при нормировке для обоих ЖК соединений, может быть оценено в 170  $\mu\text{s}$ , при характерном размере ЖК канала  $2d = 10 \mu\text{m}$ , а термомеханическая постоянная  $\xi$  оценивается как [17]  $\sim 1 \text{ pK/N}$ . В наших расчетах величина поверхностного натяжения таких ЖК материалов как 5ЦБ и 8ЦБ была выбрана равной [18]  $\gamma \sim 0.02 \text{ N/m}$  (5ЦБ), и [19,20]  $\gamma \sim 0.025 \text{ N/m}$  (8ЦБ), а размер лазерного пятна был выбран равным

$\omega = 0.5 \mu\text{m}$ . Теперь безразмерные параметры системы уравнений (6) могут быть оценены как:  $\Lambda = 2$ ,  $K_{31} = 1.3$ ,  $\bar{\omega} = \frac{\omega}{d} = 0.1$ ,  $\delta_1(5\text{ЦБ}, 8\text{ЦБ}) \sim 10^{-3}$ ,  $\delta_2(5\text{ЦБ}) \sim 0.3$ ,  $\delta_2(8\text{ЦБ}) \sim 0.32$ ,  $\delta_3(5\text{ЦБ}, 8\text{ЦБ}) \sim 10^{-6}$  и  $\delta_4(5\text{ЦБ}, 8\text{ЦБ}) \sim 10^{-4}$  соответственно. Принимая во внимание тот факт, что в процессе накачки энергии лазерным излучением значения безразмерной температуры  $\chi$  должны лежать в интервале  $[0.97-1.0]$ , значения параметра  $\delta_5$  для обоих ЖК соединений могут быть оценены как  $\delta_5(5\text{ЦБ}) \sim 7.00$  и  $\delta_5(8\text{ЦБ}) \sim 6.88$ , соответственно. Эти оценки были сделаны с учетом того факта, что продолжительность лазерного импульса мощностью  $\mathcal{O}_0 \sim 0.5 \text{ W}$  была  $\tau_{in} \sim 0.0128$  [ $\sim 2.55 \mu\text{s}$ ] при значении коэффициента абсорбции  $\alpha = 8 \text{ [m}^{-1}\text{]}$  [21].

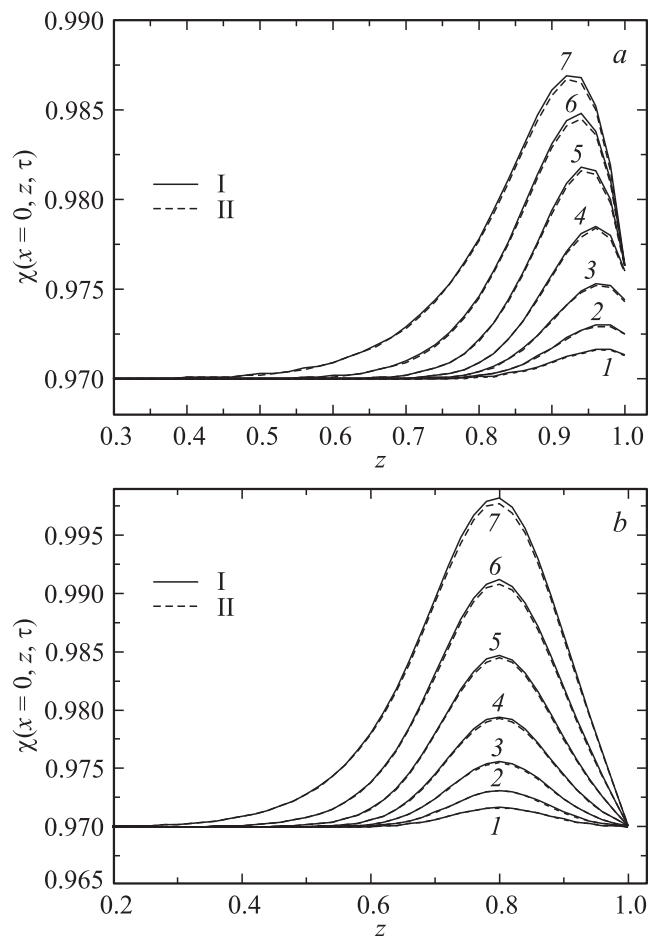
Учитывая, что  $\delta_3, \delta_4 \ll 1$ , левой частью уравнения Навье–Стокса и термомеханической добавкой в уравнении баланса энтропии в системе (6) можно пренебречь. А тот факт, что  $\delta_1 \ll 1$ , позволяет также пренебречь упругим вкладом относительно вязкого и термомеханического вкладов в баланс моментов, действующих на единицу объема ЖК фазы, а также упругим напряжением относительно вязкого и термомеханического вкладов в полный тензор напряжений.

### 3. Эволюция поля директора, температуры и скорости в ЖК канале

Процесс эволюции гидродинамического потока, а также переориентации поля директора и формирования градиента температуры в узком ЖК канале под действием лазерного излучения интенсивностью  $\mathcal{O}_0 = 0.5 \text{ W}$  и продолжительностью  $2.55 \mu\text{s}$  был описан системой нелинейных дифференциальных уравнений в частных производных (6) с учетом граничных (7)–(8) и начальных (9)–(10) условий и результаты представлены



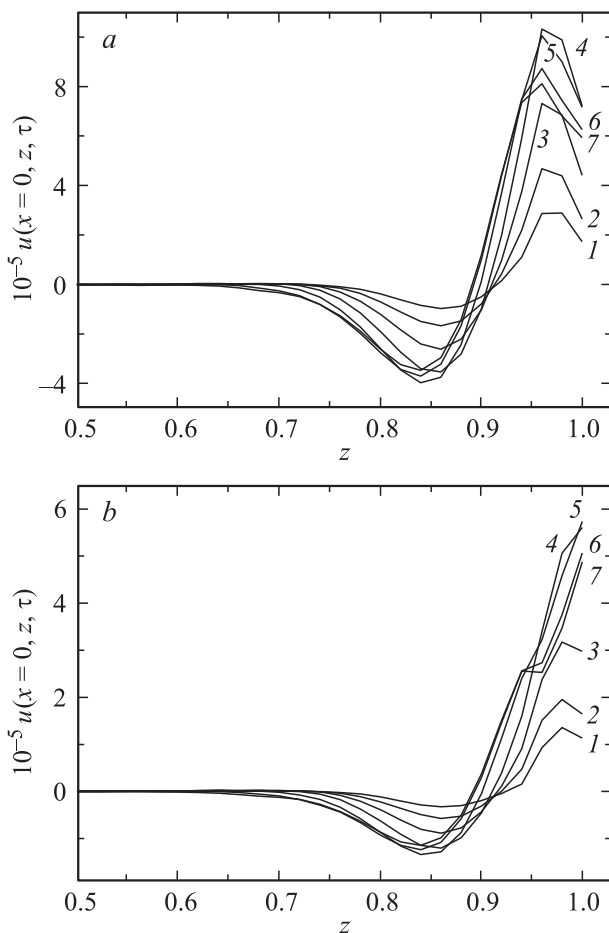
**Рис. 1.** Распределение поля директора  $\hat{n}(\tau_{in}, x, z)$  для нематиков 5ЦБ и 8ЦБ в момент максимального разогрева для режимов (I) и (II).



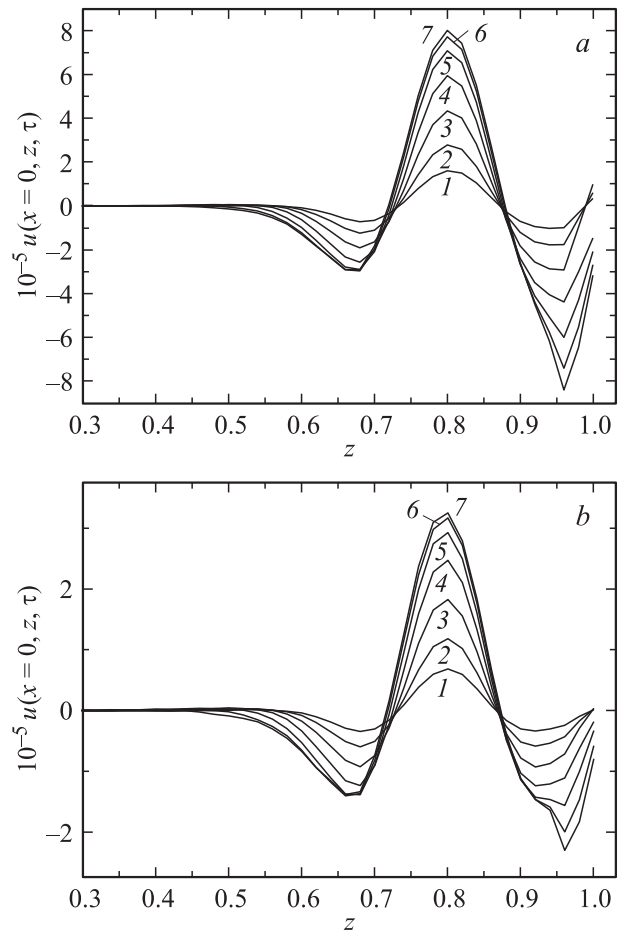
**Рис. 2.** *a*). Эволюция поля температуры  $\chi(\tau, x = 0, z)$  в нематике 5ЦБ (I) и 8ЦБ (II), соответствующая моментам времени  $\tau_i = 2^i \cdot 10^{-4}$ ,  $i = 1, 2, \dots, 7$ . Координаты фокуса лазерного пятна равны:  $x_0 = 0, z_0 = 0.98$ . *b*). Эволюция поля температуры  $\chi(\tau, x = 0, z)$  в нематике 5ЦБ (I) 8ЦБ (II). Моменты времени такие же, как на рис. *a*. Координаты фокуса лазерного пятна равны:  $x_0 = 0, z_0 = 0.8$ .

на рис. 1–4. Нами были изучены два режима прогревания ЖК фазы, первый, когда лазерное излучение было сфокусировано вблизи границы раздела ЖК фаза/вакуум на глубину  $0.1 \mu\text{m}$  (режим I), и второй, на глубину  $1.0 \mu\text{m}$  (режим II) соответственно. В обоих случаях мы имеем дело с лазерным излучением мощностью  $\mathcal{O}_0 \sim 0.5 \text{ W}$  и продолжительностью  $\sim 2.55 \mu\text{s}$ , сфокусированным в 2D ЖК канал длиной  $100 \mu\text{m}$  и глубиной в  $10 \mu\text{m}$ . Система нелинейных уравнений (6) с граничными (7)–(8) и начальными (9)–(10) условиями была решена методом релаксации [22] и сеточным методом [23], при этом в системе уравнений (6) положено  $\delta_1 = \delta_3 = \delta_4 = 0$ . В начальный момент было рассчитано поле температуры при  $n_x(\tau = 0, x, z) = n_x^{el}$  и нулевом поле скорости  $u = w = 0$ , что позволило также рассчитать функцию  $\mathcal{F}$ , компоненты матриц  $\mathcal{B}$  и  $\mathcal{C}$  (см. уравнения (П10) и (П11)) и найти численное решение уравнения баланса линейных моментов (см.

уравнение (П8)). Численный расчет функции  $h$  относительно уровня  $z = 1$  с помощью уравнения (11) позволил найти начальную поправку к полю  $n_x$  и продолжить процедуру вычислений до момента максимального разогрева ЖК фазы, продолжающегося до момента  $\tau = \tau_{in}$ . На рис. 1 представлены результаты расчета распределения поля директора в гибридно-ориентированном ЖК канале и ограниченном сверху изначально плоской свободной границей раздела ЖК фаза/вакуум для случая режима I. Прежде всего следует отметить, что продолжительность инжекции лазерного излучения  $t_{in} \sim 2.55 \mu s$  настолько мала, что поле директора практически не успевает заметно переориентироваться под действием термомеханических сил по отношению к первоначально гибридно-ориентированному полю директора  $\hat{n}(t = 0, \mathbf{r})$ . Необходимо также отметить, что время разогрева ЖК канала  $t_{in}$  для выбранного режима интенсивности лазерного излучения  $\mathcal{O}_0$  жестко



**Рис. 3.** *a*). Эволюция поля горизонтальной скорости  $u(\tau, x = 0, z)$  в нематике 5ЦБ соответствующая моментам времени  $\tau_i = 2^i \cdot 10^{-4}$ ,  $i = 1, 2, \dots, 7$ . Координаты фокуса лазерного пятна равны:  $x_0 = 0, z_0 = 0.98$ . *b*). Эволюция горизонтальной составляющей поля скорости  $u(\tau, x = 0, z)$  в нематике 8ЦБ. Моменты времени и координаты фокуса лазерного пятна такие же, как на рис. 3, *a*.



**Рис. 4.** *a*). Эволюция поля горизонтальной составляющей поля скорости  $u(\tau, x = 0, z)$  в нематике 5ЦБ в моменты времени  $\tau_i = 2^i \cdot 10^{-4}$ ,  $i = 1, 2, \dots, 7$ . Координаты фокуса лазерного пятна равны:  $x_0 = 0, z_0 = 0.80$ . *b*). Эволюция поля горизонтальной составляющей поля скорости  $u(\tau, x = 0, z)$  в нематике 8ЦБ. Моменты времени и координаты фокуса лазерного пятна такие же, как на рис. 4, *a*.

ограничено рамками существования нематической фазы для обоих ЖК материалов. Такая же картина была получена и для режима II. На рис. 2, *a, b* представлены результаты расчетов эволюции безразмерного поля температуры  $\chi(\tau, x = 0, z)$  в гибридно-ориентированных каналах, заполненных нематиками, образованными молекулами 5ЦБ и 8ЦБ и ограниченными свободными границами раздела ЖК фаза/вакуум. Результаты, представленные на обоих рисунках, соответствуют одним и тем же моментам времени  $\tau_i = 2^i \cdot 10^{-4}$  ( $i = 1, 2, \dots, 7$ ) для двух режимов разогрева ЖК фазы. Режим I представлен на рис. 2, *a*, в то время как режим II представлен на рис. 2, *b*. Второй случай (режим II) характеризуется более глубоким прогреванием ЖК канала вплоть до  $\sim 8 \mu m$ , в то время как в первом случае (режим I) прогревание достигало  $\sim 6 \mu m$ , отсчитанных в обоих случаях от границы раздела ЖК фаза/вакуум. На рис. 3 и 4 представлены результаты расчета эволюции гори-

зонтальной составляющей поля скорости  $u(\tau, x = 0, z)$  для 5ЦБ (рис. 3, *a* и 4, *a*) и 8ЦБ (рис. 3, *b* и 4, *b*), соответственно, для двух режимов разогрева. Режиму I соответствует рис. 3, а режиму II, рис. 4. Максимальные значения скорости  $\sim 10^{-4}$  (5ЦБ) [ $\sim 2.5 \mu\text{m/s}$ ] (рис. 3, *a*) и  $\sim 6 \cdot 10^{-5}$  (8ЦБ) [ $\sim 1.5 \mu\text{m/s}$ ] (рис. 3, *b*) достигались в момент максимального разогрева ЖК фазы. В случае 5ЦБ это соответствовало значению  $\sim 0.987$  [ $\sim 302.5 \text{ K}$ ], в то время как в случае 8ЦБ это соответствовало значению  $\sim 0.986$  [ $\sim 308.6 \text{ K}$ ]. При этом профили скорости  $u(\tau, x = 0, z)$  по сечению ЖК канала для обоих ЖК материалов характеризуются осцилляционным поведением с изменением переменной  $z$ . В случае режима II максимальное значение скорости  $\sim 8 \cdot 10^{-5}$  (5ЦБ) [ $\sim 2 \mu\text{m/s}$ ] (рис. 4, *a*) и  $\sim 3.5 \cdot 10^{-5}$  (8ЦБ) [ $\sim 0.88 \mu\text{m/s}$ ] (рис. 4, *b*) достигались также в момент максимального разогрева ЖК фазы. В случае 5ЦБ это соответствовало значению  $\sim 0.998$  [ $\sim 305.8 \text{ K}$ ], в то время как в случае 8ЦБ это соответствовало значению  $\sim 0.997$  [ $\sim 312.0 \text{ K}$ ]. Таким образом максимальные значения горизонтальной скорости для случая 5ЦБ в среднем в 1.5 раза больше, чем для случая 8ЦБ. Следует также отметить, что в случае 5ЦБ значение горизонтальной скорости на поверхности раздела ЖК фаза/вакуум больше, чем для 8ЦБ, как для режима I, так и для режима II. Случай разогрева, соответствующий режиму II, характеризуется отрицательными значениями горизонтальной скорости на свободной границе раздела ЖК фаза/вакуум. Необходимо также отметить незначительность деформации границы ЖК фаза/вакуум  $|h(\tau, x)| \ll 1$  в процессе разогрева ЖК материалов как для режима I, так и для режима II. Это в свою очередь характеризуется незначительными величинами вертикальной составляющей вектора скорости по сравнению с горизонтальной составляющей.

Термомеханическое давление на свободной поверхности ЖК каналов играет основную роль только в случае ЖК канала, заполненного молекулами 8ЦБ (режим I), что приводит к максимальному значению скорости на границе раздела ЖК фаза/вакуум. Величина термомеханического давления в этом случае в момент максимального разогрева в 4 раза превышает расклинивающее давление на поверхности гибридной ячейки [7],  $P_d = \frac{K_1}{d^2}$ , оцениваемое как  $\sim 0.4 \text{ N/m}^2$ .

#### 4. Заключение

В предлагаемой работе представлено исследование эволюции поля директора, скорости и температуры в ЖК каналах со свободной поверхностью под действием лазерного излучения. Нелинейное обобщение классической теории Эриксона–Лесли, допускающее учет термомеханических вкладов в выражения для компонент тензора напряжений и для вектора момента, позволило описать особенности формирования течения в микрометровом ЖК канале. Было обнаружено, что в

процессе разогрева ЖК канала лазерным излучением (мощностью порядка  $5 \text{ [W]}$  и продолжительностью порядка  $\sim 5.5 \text{ [\mu s]}$ ) произошла незначительная переориентация поля директора, порядка 1% относительно начальной гибридной ориентации. Этой переориентации поля директора оказалось достаточно для того, чтобы сформировать локальное течение в ЖК канале. При этом наибольший вклад в локальное течение вносит горизонтальная компонента поля скорости. Эволюция максимального значения горизонтальной составляющей вектора скорости на начальном этапе лазерного разогрева аналогична эволюции поля температуры. Последующий разогрев ЖК канала лазерным излучением приводит к более глубокому прогреву ЖК канала и формированию более сложного течения в глубине ЖК канала. Это, в свою очередь, сопровождается уменьшением как максимальной горизонтальной составляющей поля скорости в объеме ЖК фазы, так и значений горизонтальной составляющей скорости на свободной поверхности.

Более слабое взаимодействие градиентов директора, температуры и скорости в объеме ЖК фазы, образованной молекулами 8ЦБ, чем молекулами 5ЦБ, привело к более высоким максимальным значениям горизонтальной составляющей поля скорости для 8ЦБ на границе раздела ЖК фаза/вакуум. Влияние течения на поле температуры заметно только в случае приповерхностного лазерного разогрева (режим I), при этом максимальные значения поля температуры сдвигаются от свободной поверхности вглубь ЖК канала. Для обоих нематиков 5ЦБ и 8ЦБ перенос локализации лазерного разогрева вглубь канала (переход от режима I к режиму II) приводит к смене направления течения нематической фазы на свободной поверхности на противоположное.

Это позволяет нам сделать заключение, что локальный разогрев ЖК фазы посредством лазерного излучения является удобным инструментом для изучения влияния свободной поверхности ЖК канала на движение ЖК материала. Исследованные в работе особенности, связанные с реакцией ЖК материалов на локализованное воздействие градиента температуры, необходимо учитывать при создании измерительных приборов.

#### 5. Приложение: моменты и компоненты тензора напряжений

Мы рассматриваем нематический ЖК, где поле директора задано вектором  $\hat{\mathbf{n}} = (n_x, 0, n_z)$ , а баланс вращательных моментов, действующих на единицу объема ЖК фазы, состоит из  $\mathbf{T}_{\text{el}} = T_{\text{el}} \hat{\mathbf{j}} = \frac{\delta \mathcal{W}_{\text{E}}}{\delta \hat{\mathbf{n}}} \times \hat{\mathbf{n}}$  — упругого,  $\mathbf{T}_{\text{vis}} = T_{\text{vis}} \hat{\mathbf{j}} = \frac{\delta \mathcal{W}_{\text{vis}}}{\delta \hat{\mathbf{n}}} \times \hat{\mathbf{n}}$  — вязкого и  $\mathbf{T}_{\text{tm}} = T_{\text{tm}} \hat{\mathbf{j}} = \frac{\delta \mathcal{W}_{\text{tm}}}{\delta \hat{\mathbf{n}}} \times \hat{\mathbf{n}}$  — термомеханического вкладов [8,9]. Здесь  $\mathcal{W}_{\text{F}} = \frac{1}{2} [K_1 (\nabla \cdot \hat{\mathbf{n}})^2 + K_3 (\hat{\mathbf{n}} \times \nabla \times \hat{\mathbf{n}})^2]$  — плотность упругой энергии, приходящейся на единицу объема

ЖК фазы,

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

— вязкий,

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

— термомеханический, а

$$\mathcal{R}^{\text{th}} = \frac{1}{T} \left[ \lambda_{\parallel} (\hat{\mathbf{n}} \cdot \nabla T)^2 + \lambda_{\perp} (\nabla T - \hat{\mathbf{n}} (\hat{\mathbf{n}} \cdot \nabla T))^2 \right]$$

— термический вклады в полную функцию Рэлея  $\mathcal{R} = \mathcal{R}^{\text{vis}} + \mathcal{R}^{\text{tm}} + \mathcal{R}^{\text{th}}$ . Здесь  $K_1$  и  $K_3$  — коэффициенты упругости Франка, соответствующие поперечному и продольному изгибам,  $\mathbf{D}_s = \frac{1}{2} [\nabla \mathbf{v} + (\nabla \mathbf{v})^T]$  и  $\mathbf{D}_a = \frac{1}{2} [\nabla \mathbf{v} - (\nabla \mathbf{v})^T]$  — симметричный и антисимметричный вклады в тензор  $\nabla \mathbf{v}$ ,  $\mathbf{M} = \frac{1}{2} [\nabla \hat{\mathbf{n}} + (\nabla \hat{\mathbf{n}})^T]$  — симметричный вклад в тензор  $\nabla \hat{\mathbf{n}}$ ,  $\mathcal{M}_0 = \nabla \cdot \hat{\mathbf{n}}$  — скаляр, а  $\hat{\mathbf{n}}_t = \frac{d\hat{\mathbf{n}}}{dt}$  — материальная производная,  $\alpha_i$  ( $i = 1, \dots, 6$ ) — коэффициенты вязкости Лесли,  $\gamma_1 = \alpha_3 - \alpha_2$ ,  $\gamma_2 = \alpha_3 + \alpha_2$ ,  $\xi$  — термомеханическая постоянная,  $\lambda_{\parallel}$ ,  $\lambda_{\perp}$  — коэффициенты теплопроводности вдоль и поперек направления директора. Свертка векторов  $\mathbf{a}$  и  $\mathbf{b}$  в компонентах имеет вид  $\mathbf{a} \bullet \mathbf{b} = a_i b_i$ , а двойная свертка тензоров  $\mathbf{A}$  и  $\mathbf{B}$  определяется как  $\mathbf{A} : \mathbf{B} = A_{ij} B_{ji}$ .

Компонента безразмерного упругого момента имеет вид

$$T_{\text{el}} = n_z \mathcal{M}_{0,x} - n_x \mathcal{M}_{0,z} + K_{31} (n_z f_{,z} + n_x f_{,x}), \quad (\text{П1})$$

в то время как компоненты вязкого и термомеханического вкладов имеют вид

$$\begin{aligned} T_{\text{vis}} = & n_z n_{x,\tau} - n_x n_{z,\tau} - \frac{1}{2} (\psi_{,zz} + \psi_{,xx}) \\ & + 2\gamma_{21} \psi_{,xz} n_x n_z + \frac{1}{2} \gamma_{21} (\psi_{,zz} - \psi_{,xx}) (n_x^2 - n_z^2), \quad (\text{П2}) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} T_{\text{tm}} = & \delta_2 \chi_{,x} \left( n_x n_{z,x} - \frac{3}{2} n_z n_{x,x} + \frac{1}{2} n_x n_{x,z} \right) \\ & + \delta_2 \chi_{,z} \left( -\frac{1}{2} n_z n_{z,x} + \frac{3}{2} n_x n_{z,z} - n_z n_{x,z} \right), \quad (\text{П3}) \end{aligned}$$

соответственно.

Упругий, вязкий и термомеханический вклады в тензор напряжений определяются [8,9] формулами  $\sigma^{\text{el}} = -\frac{\partial \mathcal{W}_f}{\partial \nabla \hat{\mathbf{n}}} \cdot (\nabla \hat{\mathbf{n}})^T$ ,  $\sigma^{\text{vis}} = \frac{\partial \mathcal{R}^{\text{vis}}}{\partial \nabla \mathbf{v}}$ , и  $\sigma^{\text{tm}} = \frac{\partial \mathcal{R}^{\text{tm}}}{\partial \nabla \mathbf{v}}$ .

Безразмерные компоненты  $\sigma_{ij}^{\text{el}}$ ,  $\sigma_{ij}^{\text{vis}}$ ,  $\sigma_{ij}^{\text{tm}}$ ,  $i, j = x, z$  имеют вид

$$\begin{aligned} \sigma_{xx}^{\text{el}} = & \delta_1 [-n_{x,x} \mathcal{M}_0 + f n_{z,x}], \\ \sigma_{xz}^{\text{el}} = & \delta_1 [-n_{x,z} \mathcal{M}_0 + f n_{z,z}], \\ \sigma_{zx}^{\text{el}} = & \delta_1 [-n_{z,x} \mathcal{M}_0 - f n_{x,x}], \\ \sigma_{zz}^{\text{el}} = & \delta_1 [-n_{z,z} \mathcal{M}_0 - f n_{x,z}], \quad (\text{П4}) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \sigma_{xx}^{\text{vis}} = & \psi_{,xz} \frac{1}{\gamma_1} [\alpha_4 + (\alpha_5 + \alpha_6) n_x^2 + \alpha_1 n_x^2 (n_x^2 - n_z^2)] \\ & + \frac{\alpha_1}{\gamma_1} n_x^3 n_z (\psi_{,zz} - \psi_{,xx}) - \frac{1}{2} \gamma_{21} n_x n_z (\psi_{,zz} + \psi_{,xx}), \\ \sigma_{xz}^{\text{vis}} = & \psi_{,xz} \frac{1}{\gamma_1} [\alpha_1 n_x n_z (n_x^2 - n_z^2) + \gamma_2 n_x n_z] \\ & + \frac{1}{2} \gamma_{21} \psi_{,xx} (n_x^2 - n_z^2) + \frac{1}{\gamma_1} (\psi_{,zz} - \psi_{,xx}) \\ & \times \left[ \alpha_1 n_x^2 n_z^2 + \frac{\alpha_4}{2} + \frac{\alpha_5 + \alpha_6}{4} \right] - \frac{1}{4} (\psi_{,zz} + \psi_{,xx}), \\ \sigma_{zx}^{\text{vis}} = & -\psi_{,xz} \frac{1}{\gamma_1} [\alpha_1 n_x n_z (n_z^2 - n_x^2) + \gamma_2 n_x n_z] \\ & + \frac{1}{2} \gamma_{21} \psi_{,zz} (n_x^2 - n_z^2) + \frac{1}{\gamma_1} (\psi_{,zz} - \psi_{,xx}) \\ & \times \left[ \alpha_1 n_x^2 n_z^2 + \frac{\alpha_4}{2} + \frac{\alpha_5 + \alpha_6}{4} \right] + \frac{1}{4} (\psi_{,zz} + \psi_{,xx}), \\ \sigma_{zz}^{\text{vis}} = & -\psi_{,xz} \frac{1}{\gamma_1} [\alpha_4 + (\alpha_5 + \alpha_6) n_z^2 + (\psi_{,zz} - \psi_{,xx}) \\ & + \alpha_1 n_z^2 (n_z^2 - n_x^2)] + \alpha_1 n_z^3 n_x (\psi_{,zz} + \psi_{,xx}) \\ & + \frac{1}{2} \gamma_{21} n_x n_z (\psi_{,zz} + \psi_{,xx}). \quad (\text{П5}) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \sigma_{xx}^{\text{tm}} = & \delta_2 \chi_{,x} \left[ \frac{1}{2} M_{xx} n_x (3n_x^2 + 7) + M_{xz} n_z \left( 1 + \frac{7}{2} n_x^2 \right) \right. \\ & \left. + M_{zz} n_x \left( \frac{3}{2} + 2n_z^2 \right) \right] + \delta_2 \chi_{,z} \left[ M_{xx} n_z (n_x^2 + 1) \right. \\ & \left. + \frac{1}{2} M_{xz} n_x (3 + 5n_z^2) + \frac{3}{2} M_{zz} n_z (1 + n_z^2) \right], \\ \sigma_{xz}^{\text{tm}} = & \delta_2 \chi_{,x} \left[ \frac{1}{2} M_{xx} n_z (n_x^2 + 3) + M_{xz} n_x (3n_z^2 - \frac{1}{2}) + M_{zz} n_x^3 \right] \\ & + \delta_2 \chi_{,z} \left[ \frac{1}{2} M_{xx} n_x - \frac{1}{2} M_{xz} n_z (3 - n_x^2) - \frac{1}{2} M_{zz} n_x n_z^2 \right], \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\sigma_{zx}^{tm} &= \delta_2 \chi_{,x} \left[ -\frac{1}{2} M_{xx} n_z n_x^2 + \frac{1}{2} M_{xz} n_x (3 - n_z^2) + \frac{1}{2} M_{zz} n_z \right] \\ &+ \delta_2 \chi_{,z} \left[ M_{xx} n_x^3 + \frac{1}{2} M_{xz} n_z (3n_x^2 - 1) + \frac{1}{2} M_{zz} n_x (1 + n_z^2) \right], \\ \sigma_{zz}^{tm} &= \delta_2 \chi_{,x} \left[ \frac{3}{2} M_{xx} n_x (n_x^2 + 1) + M_{xz} n_z (3 + 5n_x^2) \right. \\ &+ \left. M_{zz} n_x (1 + n_z^2) \right] + \delta_2 \chi_{,z} \left[ M_{xx} n_z \left( 2n_x^2 + \frac{3}{2} \right) \right. \\ &+ \left. M_{xz} n_x \left( 1 + \frac{7}{2} n_z^2 \right) + \frac{1}{2} M_{zz} n_z (7 + 3n_z^2) \right]. \quad (\text{П6})\end{aligned}$$

Закон сохранения линейных моментов в терминах безразмерных напряжений имеет вид

$$\delta_3 \psi_{,x\tau} = (\sigma_{xx}^{vis} - \sigma_{zz}^{vis})_{,xz} + (\sigma_{zx}^{vis})_{,zz} - (\sigma_{xz}^{vis})_{,xx} + \mathcal{F}, \quad (\text{П7})$$

где

$$\begin{aligned}\mathcal{F} &= (\sigma_{xx}^{el} + \sigma_{xx}^{tm} - \sigma_{zz}^{el} - \sigma_{zz}^{tm})_{,xz} + (\sigma_{zx}^{el} + \sigma_{zx}^{tm})_{,zz} \\ &- (\sigma_{xz}^{el} + \sigma_{xz}^{tm})_{,xx}.\end{aligned} \quad (\text{П8})$$

Подстановка выражений (П4), (П5) и (П6) в уравнение (П7) приводит к следующим выражениям для коэффициентов  $a_i (i = 1, \dots, 12)$

$$\begin{aligned}a_1 &= \frac{1}{2} + \frac{1}{\gamma_1} \left[ \frac{\alpha_4}{2} + \frac{\alpha_5 + \alpha_6}{4} + \alpha_1 n_x^2 n_z^2 \right] \\ &+ \frac{\gamma_{21}}{2} (n_x^2 - n_z^2) \frac{\gamma_{21}^2}{4} (n_x^2 - n_z^2)^2, \\ a_2 &= -\frac{2}{\gamma_1} [\alpha_1 n_x n_z (n_z^2 - n_x^2) + \gamma_2 n_x n_z] + 2\gamma_{21}^2 n_x n_z (n_x^2 - n_z^2), \\ a_3 &= 1 + \frac{1}{\gamma_1} \left[ \alpha_4 + \frac{\alpha_5 + \alpha_6}{2} - \alpha_1 (n_x^4 + n_z^4) \right] \\ &- 4\gamma_{21}^2 n_x^2 n_z^2 + \frac{1}{2} \gamma_{21}^2 (n_x^2 - n_z^2), \\ a_4 &= \frac{2}{\gamma_1} [\alpha_1 n_x n_z (n_z^2 - n_x^2) - \gamma_2 n_x n_z] - 2\gamma_{21}^2 n_x n_z (n_x^2 - n_z^2), \\ a_5 &= \frac{1}{2} + \frac{1}{\gamma_1} \left[ \frac{\alpha_4}{2} + \frac{\alpha_5 + \alpha_6}{4} + \alpha_1 n_x^2 n_z^2 \right] - \frac{\gamma_{21}}{2} (n_x^2 - n_z^2) \\ &- \frac{\gamma_{21}^2}{4} (n_x^2 - n_z^2)^2, \\ a_6 &= \frac{1}{\gamma_1} \left[ \left( \alpha_1 + \frac{\gamma_2^2}{\gamma_1} \right) n_x n_z (n_x^2 - n_z^2) + 2\gamma_2 n_x n_z \right]_{,x} \\ &+ \frac{1}{\gamma_1} \left[ \alpha_1 n_x^2 n_z^2 + \frac{\gamma_2}{2} (n_x^2 - n_z^2) \right]_{,z} - \frac{\gamma_{21}^2}{4} \left[ (n_x^2 - n_z^2)_{,z}^2 \right]_{,z},\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}a_7 &= -\frac{2}{\gamma_1} [\alpha_1 n_x n_z (n_x^2 - n_z^2) + \gamma_2 n_x n_z]_{,z} \\ &- \frac{1}{\gamma_1} \left[ \alpha_1 (n_x^2 - n_z^2)^2 + 4 \frac{\gamma_2^2}{\gamma_1} (n_x^2 - n_z^2) \right]_{,x} \\ &+ \frac{1}{4} [1 + \gamma_{21} (n_x^2 - n_z^2)]_{,x}^2 + 2\gamma_{21}^2 [n_x n_z (n_x^2 - n_z^2)]_{,z}, \\ a_8 &= \frac{1}{\gamma_1} \left[ \left( -\alpha_1 + \frac{\gamma_2^2}{4\gamma_1} \right) (n_z^2 - n_x^2)^2 - \left( 2\alpha_1 + \frac{4\gamma_2^2}{\gamma_1} \right) n_x^2 n_z^2 \right]_{,z} \\ &+ \frac{2}{\gamma_1} \left[ \left( \alpha_1 + \frac{\gamma_2^2}{\gamma_1} \right) (n_z^2 - n_x^2) n_x n_z - \gamma_2 n_x n_z \right]_{,x}, \\ a_9 &= \frac{1}{\gamma_1} \left[ -\left( \alpha_1 + \frac{\gamma_2^2}{\gamma_1} \right) n_x n_z (n_x^2 - n_z^2) - 2\gamma_2 n_x n_z \right]_{,z} \\ &+ \frac{1}{\gamma_1} \left[ \alpha_1 n_x^2 n_z^2 - \frac{\gamma_2}{2} (n_x^2 - n_z^2) \right]_{,x} - \frac{\gamma_{21}^2}{4} \left[ (n_x^2 - n_z^2)_{,x}^2 \right]_{,x}, \\ a_{10} &= \frac{1}{\gamma_1} \left[ \alpha_1 n_x^2 n_z^2 + \frac{3\gamma_2}{4} (n_x^2 - n_z^2) \right]_{,zz} \\ &- \frac{1}{\gamma_1} \left[ \alpha_1 n_x^2 n_z^2 + \frac{\gamma_2}{4} (n_x^2 - n_z^2) \right]_{,xx} \\ &+ \frac{\gamma_{21}}{4} (n_x^2 - n_z^2) \left[ (n_x^2 - n_z^2)_{,xx} - 2(n_x^2 - n_z^2)_{,zz} \right] \\ &- \left[ \frac{\alpha_1}{\gamma_1} n_x n_z (n_z^2 - n_x^2) - \gamma_{21} n_x n_z \right]_{,xz} + \gamma_{21}^2 n_x n_z (n_x^2 - n_z^2)_{,xz} \\ &+ \gamma_{21}^2 \left[ (n_x n_z)_{,x} (n_x^2 - n_z^2)_{,z} + (n_x n_z)_{,z} (n_x^2 - n_z^2)_{,x} \right] \\ &- \gamma_{21}^2 \left[ \frac{1}{4} \left( (n_x^2 - n_z^2)_{,z} \right)^2 - \frac{1}{4} \left( (n_x^2 - n_z^2)_{,x} \right)^2 \right], \\ a_{11} &= -\frac{1}{\gamma_1} [\alpha_1 n_x n_z (n_x^2 - n_z^2)]_{,xx} - \frac{1}{\gamma_1} [\alpha_1 n_x n_z (n_x^2 - n_z^2)]_{,zz} \\ &- \frac{\alpha_1}{\gamma_1} \left[ (n_x^2 - n_z^2)_{,xz}^2 \right]_{,xz} - \gamma_{21}^2 [n_x n_z (n_z^2 - n_x^2)_{,zz} + (n_x n_z)_{,zz} \\ &\times (n_x^2 - n_z^2)] - \gamma_{21}^2 [-n_x n_z (n_z^2 - n_x^2)_{,xx} + (n_x n_z)_{,xx} \\ &\times (n_x^2 - n_z^2)] + \gamma_{21}^2 [8n_x n_z (n_z n_x)_{,xz} + 8(n_z n_x)_{,z} (n_z n_x)_{,x}] \\ &+ \gamma_{21}^2 \left[ (n_z n_x)_{,z} (n_x^2 - n_z^2)_{,x} + (n_z n_x)_{,x} (n_x^2 - n_z^2)_{,z} \right], \\ a_{12} &= \frac{1}{\gamma_1} \left[ \alpha_1 n_x^2 n_z^2 - \frac{3\gamma_2}{4} (n_x^2 - n_z^2) \right]_{,xx} + \frac{1}{\gamma_1} [\alpha_1 n_x^2 n_z^2 \\ &+ \frac{\gamma_2}{4} (n_x^2 - n_z^2)]_{,zz} + \frac{\gamma_{21}^2}{4} (n_x^2 - n_z^2) \left[ (n_x^2 - n_z^2)_{,zz} \right. \\ &- \left. 2(n_x^2 - n_z^2)_{,xx} \right] - \left[ \frac{\alpha_1}{\gamma_1} n_x n_z (n_z^2 - n_x^2) - \gamma_{21} n_x n_z \right]_{,xz} \\ &- \gamma_{21} (n_x n_z)_{,xz} [1 + \gamma_{21} (n_x^2 - n_z^2)] - \gamma_{21}^2 n_x n_z (n_x^2 - n_z^2)_{,xz} \\ &- \gamma_{21}^2 \left[ (n_x n_z)_{,z} (n_x^2 - n_z^2)_{,x} + (n_x n_z)_{,x} (n_x^2 - n_z^2)_{,z} \right] \\ &- \frac{\gamma_{21}^2}{4} \left[ \left( (n_x^2 - n_z^2)_{,z} \right)^2 - \left( (n_x^2 - n_z^2)_{,x} \right)^2 \right], \quad (\text{П9})\end{aligned}$$



Матричное уравнение

$$\hat{\mathcal{B}} \cdot \Psi = \mathbf{C},$$

для вектора  $\Psi = (\psi_{,xx}, \psi_{,xz}, \psi_{,zz})$  содержит матрицу коэффициентов  $\hat{\mathcal{B}}$ , определяемую вязкими моментом и напряжениями на свободной поверхности, ее компоненты задаются в виде  $b_{ij}$  ( $i, j = 1, 2, 3$ )

$$\begin{aligned} b_{11} &= (n_x)_{z=h} \left( 2\gamma_{21} - \gamma_{21}^2 + \frac{2\alpha_4 + \alpha_5 + \alpha_6 - 2\alpha_1}{2\gamma_1} \right), \\ b_{12} &= -\frac{\alpha_4 + \alpha_5 + \alpha_6 + \alpha_1}{\gamma_1}, \\ b_{13} &= (n_x)_{z=h} \left( \gamma_{21} + \gamma_{21}^2 - \frac{2\alpha_4 + \alpha_5 + \alpha_6 + 2\alpha_1}{2\gamma_1} \right), \\ b_{21} &= \frac{1}{4} - \frac{2\alpha_4 + \alpha_5 + \alpha_6}{4\gamma_1}, \\ b_{22} &= (n_x)_{z=h} \left( -\gamma_{21}^2 - \frac{2\alpha_4 + \alpha_5 + \alpha_6 + 2\alpha_1}{\gamma_1} \right), \\ b_{23} &= \frac{1}{2} - \frac{\gamma_{21}}{2} - \frac{\gamma_{21}^2}{4} + \frac{2\alpha_4 + \alpha_5 + \alpha_6}{4\gamma_1}, \\ b_{31} &= \frac{\gamma_{21} - 1}{2}, \\ b_{32} &= -2\gamma_{21}(n_x)_{z=h}, \\ b_{33} &= -\frac{\gamma_{21} + 1}{2}, \end{aligned} \quad (\text{П10})$$

вектор  $\mathbf{C} = (c_1, c_2, c_3)$  определяется моментами и напряжениями, отнесенными к поверхности  $z = h$  и имеет компоненты

$$\begin{aligned} c_1 &= -2\mathcal{P} + 2\gamma(n_{x,x})_{z=h}, \\ c_2 &= \frac{\delta_1}{2} (\gamma_{21} - 1) [3\chi_{,x}n_{x,x} + \chi_{,z}n_{x,z}]_{z=h}, \\ c_3 &= \delta_1 \left[ \frac{3}{2}\chi_{,x}n_{x,x} + \chi_{,z}n_{x,z} \right]_{z=h}. \end{aligned} \quad (\text{П11})$$

$\mathcal{P} = \frac{\delta_2}{2}(\sigma_{xx}^{tm} + \sigma_{zz}^{tm})_{z=h} + \frac{\delta_1}{2}(\sigma_{xx}^{el} + \sigma_{zz}^{el})_{z=h}$  — безразмерное давление на поверхности раздела ЖК фаза/вакуум.

Вектор потока тепла  $\mathbf{q}$  определяется как в [17]:  $\mathbf{q} = -T \frac{\partial \mathcal{R}}{\partial \nabla T}$  и его безразмерные компоненты имеют вид

$$\begin{aligned} -q_x &= \chi_{,x} (\Lambda n_x^2 + n_z^2) + (\Lambda - 1)n_x n_z \chi_{,z} + \delta_4 \nabla_x \left( \chi \frac{\partial \mathcal{R}^{tm}}{\partial \nabla \chi} \right), \\ -q_z &= \chi_{,z} (\Lambda n_z^2 + n_x^2) + (\Lambda - 1)n_x n_z \chi_{,x} + \delta_4 \nabla_z \left( \chi \frac{\partial \mathcal{R}^{tm}}{\partial \nabla \chi} \right). \end{aligned} \quad (\text{П12})$$

## Список литературы

- [1] J.W. Goodby, P.J. Collings, T. Kato, C. Tschierske, H. Gleeson, P. Raynes. Handbook of Liquid Crystals. 2nd ed. Wiley John Wiley and Sons, N.Y. (2014). 5240 p.
- [2] G. Napoli, L. Vergoni. Phys. Rev. E **85**, 061 701 (2012).
- [3] P.C. Акопян, P.B. Алавердян, Л.Х. Мурадян, Г.Е. Сеферян, Ю.С. Чилингарян. Квантовая электрон. **33**, 81 (2003).
- [4] P.C. Акопян, P.B. Алавердян, А.Г. Аракелян, С.Ц. Нерсисян, Ю.С. Чилингарян. Квантовая электрон. **34**, 267 (2004).
- [5] A.K. Aleksenyanyan, G.S. Gevorgyan, R.S. Hakobyan, R.B. Alaverdyan. Int. J. Mod. Phys.: Conf. Ser. **15**, 120 (2012).
- [6] A.V. Zakharov, A.A. Vakulenko. J. Chem. Phys. **127**, 084 907 (2007).
- [7] P.G. de Gennes, J. Prost. The physics of liquid crystals. Oxford Univ. Press, Oxford (1995). 400 p.
- [8] J.L. Ericksen. Arch. Ration. Mech. Anal. **4**, 231 (1960).
- [9] F.M. Leslie. Arch. Ration. Mech. Anal. **28**, 265 (1968).
- [10] С. Гроот, П. Мазур. Неравновесная термодинамика. Мир, М. (1964). 456 с.
- [11] A.V. Zakharov, A.A. Vakulenko. Phys. Rev. **79**, 011 708 (2009).
- [12] W.H. de Jeu. Physical properties of Liquid Crystal Materials. Gordon and Breach, N.Y. (1980). 134 p.
- [13] N.V. Madhusudana, R.B. Ratibha. Mol. Cryst. Liq. Cryst. **89**, 249 (1982).
- [14] A.G. Chmielewski. Mol. Cryst. Liq. Cryst. **132**, 319 (1986).
- [15] M. Marinelli, A.K. Ghosh, F. Mercury. Phys. Rev. E **63**, 061 713 (2001).
- [16] P. Jamee, G. Pitsi, J. Thoen. Phys. Rev. E **66**, 021 707 (2002).
- [17] P.C. Акопян, Б.Я. Зельдович. ЖЭТФ **87**, 1660 (1984).
- [18] M.G.J. Gannon, T.E. Fabre. Phil. Mag. **37**, 117 (1978).
- [19] A.B. Захаров, А.А. Вакуленко. ФТТ **53**, 1445 (2011).
- [20] M. Iwamoto, I. Sliwa, A.V. Zakharov. Chem. Phys. Lett. **534**, 23 (2012).
- [21] I.-C. Khoo, S.-T. Wu. Optics and Nonlinear Optics of Liquid Crystal. World Scientific, Singapore (1993). P. 59.
- [22] П. Роуч. Вычислительная гидродинамика. Мир, М. (1980). 618 с.
- [23] А.А. Самарский, Е.С. Николаев. Методы решения сеточных уравнений. Наука, М. (1978). 592 с.