14,15

Формирование вихревых течений в жидкокристаллических фазах инкапсулированных в микролитровые объемы под действием сфокусированного лазерного излучения

© А.В. Захаров

Институт проблем машиноведения РАН,
Санкт-Петербург, Россия

E-mail: alexandre.zakharov@yahoo.ca

(Поступила в Редакцию 17 января 2018 г.)

Предложено теоретическое описание процесса формирования вихревых течений $\mathbf{v}(t, \mathbf{r})$ и эволюции поля директора $\hat{\mathbf{n}}$ в микролитровых жидкокристаллических (ЖК) объемах со свободной поверхностью под действием градиента температуры $\nabla T(t, \mathbf{r})$, инициируемого сфокусированным лазерным излучением. В рамках нелинейного обобщения классической теории Эриксена–Лесли учтены термомеханические вклады как в тензор напряжений, так и в вязкий момент, действующие на единицу объема ЖК-фазы, что позволило описать зарождение и формирование вихревых потоков в нематиках, образованных молекулами 4-н-пентил-4′-цианобифенила. Численными методами были исследованы различные гидродинамические режимы формирования вихрей в микроразмерных ЖК-объемах под действием сфокусированного лазерного излучения.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант № 16-02-00041а).

DOI: 10.21883/FTT.2018.07.46135.011

1. Введение

Наряду с широким использованием жидких кристаллов (ЖК) в производстве ЖК-дисплеев другой не менее интригующей областью применения ЖК является микро- и нанофлуидистика, т. е., наука о движении молекулярной жидкости в микро- и наноразмерных каналах и капиллярах. Молекулярные жидкости инкапсулированные в микро- и нанолитровые объемы находят применение в разнообразных сенсорах и датчиках используемых в биотехнологических приложениях, медицине и фармокологии, а также в иммерсионной литографии. Методы микро- и нанофлуидистики находят также применение при исследовании процессов транспортировки и сортировки нанолитровых капель жидкости и ЖК в разветвленных каналах и капиллярах (lab-on-chip-system) под действием электрического поля (электрокинетика) [1]. Еще один из путей манипулирования такими молекулярными системами — это формирование градиентов поверхностного натяжения (ГПН) на границах раздела жидкость/газ и жидкость/твердое тело [2]. Было показано, что разность ГПН инициируемая локализованным разогревом способна привести в движение микролитровые капли молекулярной жидкости в микроразмерных капиллярах [3]. Также недавно был предложен новый метод транспортировки микролитровых ЖК-капель инкапсулированных в микроразмерные каналы и капилляры под действием градиента температуры, создаваемого за счет разности температур на ограничивающих поверхностях [4,5]. А принимая во внимание тот факт, что такая разновидность ЖК-систем, как лиотропные ЖК, составляют основу многих сложных биологических организмов [6,7], то возможность манипулирования такими биосистемами посредством локального формирования градиентов температуры открывает новые перспективы в биотехнологических приложениях. В свою очередь, локальный разогрев микроразмерной ЖК-системы (ЖК-капельки) возможен с помощью лазерного излучения сфокусированного как в объеме ЖК-фазы [3,5], так и на свободной границе раздела ЖК-фаза/воздух [8]. Наличие свободной ограничивающей поверхности в таких ЖК-системах влияет на характер переориентации поля директора и формирование вихревых потоков под действием сфокусированного лазерного излучения [9]. Было показано, что основным физическим механизмом ответственным за возникновение гидродинамических потоков в ЖК-системах инкапсулированных в микроразмерные каналы и капилляры является взаимодействие градиентов поля директора ЖК-фазы и температуры [4,10]. Если локальный градиент температуры в объеме такой ЖК-фазы легко формируется с помощью сфокусированного лазерного излучения, то градиент поля директора удается сформировать посредством гибридной ориентации ЖК-фазы на ограничивающих поверхностях. В случае ЖК-фазы со свободной поверхностью на границе раздела ЖК-фаза/воздух всегда формируется гомеотропная ориентация молекул образующих ЖК-систему [11]. Таким образом, гибридная ориентация поля директора внутри микролитровой ЖК-ячейки со свободной границей раздела может быть достигнута посредством планарной ориентации молекул ЖК-фазы вдоль нижней и боковых ограничивающих поверхностей. Таким образом, все это указывает на то, что существует возможность немеханической транспортировки или сортировки микролитровых объемов ЖК-фазы под действием сфокусированного лазерного излучения. Поэтому для того, чтобы эффективно манипулировать микроразмерными объемами жидкости (капельками), необходимо изучить влияние внешних сил как на структурные, так и на динамические свойства таких систем.

Целью нашего исследования является описание эволюции поля директора $\hat{\mathbf{n}}$ и формирование вихревых потоков $\mathbf{v}(t,\mathbf{r})$ в микролитровых ЖК-ячейках со свободной поверхностью под действием градиента температуры $\nabla T(t,\mathbf{r})$, инициируемого сфокусированным лазерным излучением. Эти исследования будут проведены в рамках нелинейного обобщения классической теории Эриксена–Лесли [12,13], с учетом не только баланса массы, импульсов и угловых моментов действующих на единицу объема ЖК-фазы, но и с учетом баланса энтропии [14]. При этом будут учтены термомеханические вклады как в полную диссипационную функцию Релея, так и в баланс моментов [4,10]. Численными методами будут исследованы различные гидродинамические режимы формирования вихрей в микроразмерных ЖК-каналах под действием сфокусированного лазерного излучения.

2. Основные гидродинамические уравнения

Рассмотрим длинную прямоугольную ЖК-ячейку с размерами $2L$ и $2d$ $(L \gg d)$, ограниченную нижней твердой горизонтальной и двумя вертикальными поверхностями, в то время как сверху ЖК-фаза граничит с воздухом. Допустим, что директор $\hat{\mathbf{n}} = n_x\hat{\mathbf{i}} + n_z\hat{\mathbf{k}}$ все время находится в плоскости XZ и при этом планарно ориентирован на нижней горизонтальной и двух вертикальных поверхностях и гомеотропно на свободной поверхности, граничащей с воздухом. Таким образом, мы имеем дело с гибридно-ориентированной ЖК(ГОЖК)-фазой, характеризующейся сильным сцеплением ЖК-молекул с ограничивающими поверхностями. В дальнейшем будем считать, что система координат отсчитывается от середины ЖК-ячейки так, что ось X и орт $\hat{\mathbf{i}}$ совпадают с направлением директора на нижней горизонтальной поверхности $(\hat{\mathbf{i}} \parallel \hat{\mathbf{n}}_{z=-d})$, в то время как ось Z и орт $\hat{\mathbf{k}}$ направлены ортогонально $(\hat{\mathbf{k}} \perp \hat{\mathbf{n}}_{z=-d})$, а орт $\hat{\mathbf{j}} = \hat{\mathbf{k}} \times \hat{\mathbf{i}}$. Таким образом, в объеме ЖК-фазы формируется градиент поля директора $\nabla\hat{\mathbf{n}}$. При этом верхняя, изначально горизонтальная свободная поверхность раздела ЖК фаза/воздух под действием лазерного излучения деформируется, и эта деформация характеризуется кривизной κ, а также нормалью $\boldsymbol{\nu}$ и единичным касательным вектором $\hat{\mathbf{t}}$. Под действием лазерного излучения в исследуемой среде возникает градиент температуры ∇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 [4]. Таким образом, вследствие формирования гидродинамического течения $\mathbf{v}$ в ЖК-ячейке под действием лазерного излучения происходит переориентация поля директора $\hat{\mathbf{n}}$, которая может быть описана в рамках обобщенной теории Эриксена–Лесли [12,13], учитывающей баланс массы, импульсов, угловых моментов и энтропии [4,5]. Принимая во внимание микроскопические размеры ЖК-канала мы можем предположить, что плотность ρ ЖК-системы постоянна и мы имеем дело с несжимаемой жидкостью. Это позволяет нам записать уравнения сохранения в виде [4,5,9]

$$\nabla \cdot \mathbf{v} = 0, \tag{1}$$

$$\mathbf{T}_{\mathrm{el}} + \mathbf{T}_{\mathrm{vis}} + \mathbf{T}_{\mathrm{tm}} = 0, \tag{2}$$

$$\rho\,\frac{d\mathbf{v}}{dt} = \nabla \cdot \sigma, \tag{3}$$

где $\mathbf{T}_{\mathrm{el}} = \frac{\delta \mathscr{W}_{\mathrm{el}}}{\delta \hat{\mathbf{n}}}\,\hat{\mathbf{n}}$ — упругий, $\mathbf{T}_{\mathrm{vis}} = \frac{\delta \mathscr{R}^{\mathrm{vis}}}{\delta \hat{\mathbf{n}}_t}\,\hat{\mathbf{n}}$ — вязкий и $\mathbf{T}_{\mathrm{tm}} = \frac{\delta \mathscr{R}^{\mathrm{tm}}}{\delta \hat{\mathbf{n}}_t}\,\hat{\mathbf{n}}$ термомеханический вклады в баланс моментов действующих на единицу объема ЖК-фазы. Здесь $\sigma = \sigma_{\mathrm{el}} + \sigma_{\mathrm{vis}} + \sigma_{\mathrm{tm}} + \sigma_{\mathrm{th}} - P\mathscr{E}$ — тензор напряжений, состоящий из упругого $\sigma^{\mathrm{el}} = -\frac{\partial \mathscr{W}_{\mathrm{el}}}{\partial \nabla \hat{\mathbf{n}}}\,(\nabla\hat{\mathbf{n}})^T$, вязкого $\sigma^{\mathrm{vis}} = \frac{\delta \mathscr{R}^{\mathrm{vis}}}{\delta \nabla \mathbf{v}}$, термомеханического $\sigma^{\mathrm{tm}} = \frac{\delta \mathscr{R}^{\mathrm{tm}}}{\delta \nabla \mathbf{v}}$ и термического $\sigma^{\mathrm{th}} = \frac{\delta \mathscr{R}^{\mathrm{th}}}{\delta \nabla \mathbf{v}}$ вкладов соответственно, P — гидростатическое давление в ЖК-системе и $\mathscr{E}$ — единичный тензор. Выражение для полной диссипационной функции Релея имеет вид $\mathscr{R} = \mathscr{R}^{\mathrm{vis}} + \mathscr{R}^{\mathrm{tm}} + \mathscr{R}^{\mathrm{th}}$, в то время как плотность упругой энергии может быть записана в виде $2\mathscr{W}_{\mathrm{el}} = K_1\,(\nabla\hat{\mathbf{n}})^2 + K_3\,(\hat{\mathbf{n}}\nabla\hat{\mathbf{n}})^2$, где K_1 и K_3 — коэффициенты упругости Франка соответствующие поперечному и продольному изгибам. Выражение для вязкого вклада в диссипационную функцию Релея имеет вид $\mathscr{R}^{\mathrm{vis}} = \alpha_1\big(\hat{\mathbf{n}}\mathbf{D}_s\hat{\mathbf{n}}\big)^2 + \gamma_1\big(\hat{\mathbf{n}}_t - \mathbf{D}_a\hat{\mathbf{n}}\big)^2 + 2\gamma_2\big(\hat{\mathbf{n}}_t - \mathbf{D}_a\hat{\mathbf{n}}\big) \times \big(\mathbf{D}_s\hat{\mathbf{n}} - \big(\hat{\mathbf{n}}\mathbf{D}_s\hat{\mathbf{n}}\big)\hat{\mathbf{n}}\big) + \alpha_4\mathbf{D}_s : \mathbf{D}_s + (\alpha_5+\alpha_6)\big(\hat{\mathbf{n}}\mathbf{D}_s\mathbf{D}_s\hat{\mathbf{n}}\big)$, в то время как термомеханический и термический вклады в диссипационную функцию Релея могут быть записаны в виде $\frac{1}{\xi}\mathscr{R}^{\mathrm{tm}} = \big(\hat{\mathbf{n}}\nabla T\big)\mathbf{D}_s : \mathbf{M} + \nabla T\mathbf{D}_s\mathbf{M}\hat{\mathbf{n}} + \big(\hat{\mathbf{n}}\nabla T\big) \times \big(\hat{\mathbf{n}}_t - \mathbf{D}_a\hat{\mathbf{n}} - 3\mathbf{D}_s\hat{\mathbf{n}} + 3\big(\hat{\mathbf{n}}\mathbf{D}_s\hat{\mathbf{n}}\big)\,\hat{\mathbf{n}}\big)\,\mathbf{M}\hat{\mathbf{n}} + \hat{\mathbf{n}}\,(\nabla\mathbf{v})^T\,\mathbf{M}\,\nabla T + \frac{1}{2}\,(\hat{\mathbf{n}}\mathbf{D}_s\hat{\mathbf{n}})\nabla T\mathbf{M}\hat{\mathbf{n}} + \hat{\mathbf{n}}_t\mathbf{M}\nabla T + \frac{1}{2}\,\mathscr{M}_0\nabla T\nabla\mathbf{v}\hat{\mathbf{n}} + \big(\hat{\mathbf{n}}\nabla T\big)\mathscr{M}_0 \times \big(\hat{\mathbf{n}}\mathbf{D}_s\hat{\mathbf{n}}\big) + \frac{1}{2}\,\mathscr{M}_0\hat{\mathbf{n}}_t\nabla T$ и $\mathscr{R}^{\mathrm{th}} = \frac{1}{T}\,\big(\lambda_{\parallel}\,(\hat{\mathbf{n}}\nabla T)\big)^2 + \lambda_{\perp} \times \big(\nabla T - \hat{\mathbf{n}}\big(\hat{\mathbf{n}}\nabla T\big)^2\big)$ соответственно. Здесь α_1–α_6 — коэффициенты вязкости Лесли, γ_1 и γ_2 — коэффициенты вращательной и сдвиговой вязкости соответственно, ξ — термомеханическая постоянная, а $\lambda_{\parallel}$ и $\lambda_{\perp}$ — коэффициенты теплопроводности ЖК-фазы, соответствующие параллельному и перпендикулярному направлению директора соответственно. Симметричный и антисимметричный вклады в тензор градиента скорости принимают вид $2\mathbf{D}_s = \nabla\mathbf{v} + (\nabla\mathbf{v})^T$ и $2\mathbf{D}_a = \nabla\mathbf{v} - (\nabla\mathbf{v})^T$ соответственно, тензор $2\mathbf{M} = \nabla\hat{\mathbf{n}} + (\nabla\hat{\mathbf{n}})^T$, и $\mathscr{M}_0 = \nabla\hat{\mathbf{n}}$ — скалярный инвариант тензора $\mathbf{M}$. Здесь символ T означает транспонирование матрицы, соответствующей $\nabla\mathbf{v}$.

В дальнейшем будем исследовать гидродинамические режимы $\nabla T \sim 1\,\mathrm{K}/\mu\mathrm{m}$, возникающие в ЖК-канале микронных размеров под действием сфокусированного лазерного излучения через верхнюю свободную поверхность. При этом поле температуры $T(x,z,t)$ удовлетворяет уравнению теплопроводности [4,5,9]

$$\rho C_P\,\frac{dT}{dt} = -\nabla\mathbf{q} + \mathscr{O}(x,z)\,, \tag{4}$$

где вектор $\mathbf{q} = -T\frac{\delta\mathscr{R}}{\delta\nabla T}$ представляет собой тепловой поток в ЖК-систему, а C_P – теплоемкость ЖК-фазы, $\mathscr{O}(x,z) = \mathscr{O}_0 \exp\left[-2\,\frac{(x-x_0)^2+(z-z_0)^2}{\Delta^2}\right]\mathscr{H}(t_{\mathrm{in}}-t)$ — плотность внутренних источников тепла [9], $\mathscr{H}(t_{\mathrm{in}}-t)$ — функция Хевисайда, $\mathscr{O}_0 = \frac{2}{\pi}\frac{\alpha\mathscr{V}_0}{\Delta^2}$ — коэффициент теплового потока, α — коэффициент абсорбции, $\mathscr{V}_0$ — мощность лазерного излучения, Δ — размер Гауссового пятна лазерного излучения, t_{in} — продолжительность накачки лазерной энергии в ЖК-образец, а x_0 и z_0 — координаты центра лазерного пятна.

При этом будем считать, что температура на всех твердых ограничивающих поверхностях постоянна и равна

$$T_{-L<x<L,z=-d} = T_{x=\pm L,-d<z<d} = T_0, \tag{5}$$

в то время как через верхнюю свободную поверхность отсутствует поток тепла, так что граничное условие на свободной поверхности может быть записано в виде

$$(\mathbf{q}_{z=H}\cdot\boldsymbol{\nu}) = 0, \tag{6}$$

где функция $H(t,x)$ описывает деформацию свободной поверхности в процессе прогревания ЖК-канала. Поле скорости $\mathbf{v} = u\hat{\mathbf{i}} + w\hat{\mathbf{k}}$, образованное горизонтальной $u \equiv v_x(x,z,t)$ и вертикальной $w \equiv v_z(x,z,t)$ составляющими, подчиняется условию прилипания на твердых ограничивающих поверхностях

$$\mathbf{v}_{-L<x<L,z=-d} = \mathbf{v}_{x=\pm L,-d<z<d} = 0, \tag{7}$$

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

$$\begin{gathered}(\mathbf{T}_{\mathrm{el}} + \mathbf{T}_{\mathrm{vis}} + \mathbf{T}_{\mathrm{tm}})_{z=H} = 0,\\ \boldsymbol{\nu}\cdot\sigma_{z=H}\cdot\boldsymbol{\nu} = \gamma\kappa,\\ \boldsymbol{\nu}\cdot\sigma_{z=H}\cdot\hat{\mathbf{t}} = 0.\end{gathered} \tag{8}$$

Здесь γ — коэффициент поверхностного натяжения свободной ЖК-поверхности. Зная функцию $z = H(t,x)$, мы можем определить нормальный $\boldsymbol{\nu} = \left[-\frac{H_{,x}}{\sqrt{H_{,x}^2+1}},\,1\right]$ 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 $\hat{\mathbf{n}}_{z=H} = -\boldsymbol{\nu}$.

Уравнение описывающее деформацию свободной поверхности $H(x,t)$, вызванную локальным разогревом ЖК-материала, принимает вид

$$\frac{\partial H}{\partial t} = w_{z=H} - u_{z=H}H_{,x}, \tag{9}$$

где $u_{z=H}$ и $w_{z=H}$ горизонтальная и вертикальная компонента вектора скорости $\mathbf{v}$ на границе раздела ЖК-фаза/воздух соответственно. Система безразмерных уравнений, описывающих эволюцию поля директора, скорости и температуры под действием источника тепла может быть записана в виде

$$\begin{aligned} n_z n_{x,\tau} - n_x n_{z,\tau} ={}& \delta_1\left[n_z\mathscr{M}_{0,x} - n_x\mathscr{M}_{0,z} + K_{31}\left(n_z f_{,z} + n_x f_{,x}\right)\right]\\ &- \frac{1}{2}\psi_{,xx}\left[1 + \gamma_{21}\left(n_x^2 - n_z^2\right)\right] - \frac{1}{2}\psi_{,zz}\left[1 - \gamma_{21}\left(n_x^2 - n_z^2\right)\right]\\ &+ 2\gamma_{21}\psi_{,xz}n_x n_z + \psi_{,z}\mathscr{N}_x + \mathscr{N}_z\psi_{,x} + \delta_2\left(\chi_{,x}\mathscr{L}_{,x} + \chi_{,z}\mathscr{L}_{,z}\right), \end{aligned} \tag{10}$$

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

$$\begin{aligned} \chi_{,\tau} ={}& \left[\chi_{,x}\left(\Lambda n_x^2 + n_z^2\right) + \left(\Lambda - 1\right)n_x n_z\chi_{,z}\right]_{,x}\\ &+ \left[\chi_{,z}\left(\Lambda n_z^2 + n_x^2\right) + \left(\Lambda - 1\right)n_x n_z\chi_{,x}\right]_{,z} + \delta_4\chi\left(\nabla\frac{\partial\mathscr{R}^{tm}}{\partial\nabla\chi}\right)\\ &+ \delta_5\mathscr{O}(x,z,\tau) - \psi_{,z}\chi_{,x} + \psi_{,x}\chi_{,z}, \end{aligned} \tag{12}$$

где $\tau = \frac{t}{t_T}$ — безразмерное время, $t_T = \frac{\rho C_p d^2}{\lambda_\perp}$ — характерное время используемое для нормировки, $\gamma_{21} = \gamma_2/\gamma_1$ — отношение коэффициентов вращательной вязкости, $\psi = \frac{t_T}{d^2}\psi$ — безразмерный аналог функции тока ψ для поля скорости $\mathbf{v} = u\hat{\mathbf{i}} + w\hat{\mathbf{k}} = -\nabla\hat{\mathbf{j}}\psi$, $\chi(x,z,\tau) = T(x,z,\tau)/T_{\mathrm{NI}}$ — безразмерная температура, T_{NI} — температура фазового перехода нематик-изотропное состояние, $f = n_{x,z} - n_{z,x}$, $n_{z,\tau} = \frac{\partial n_z}{\partial\tau}$, $\mathscr{M}_0 = \nabla\cdot\hat{\mathbf{n}}$, $\mathscr{N}_z = n_z n_{x,z} - n_x n_{z,z}$, $\mathscr{L}_x = n_x n_{z,x} - \frac{3}{2}n_z n_{x,x} + \frac{1}{2}n_x n_{x,z}$, $\mathscr{L}_z = -n_z n_{x,z} + \frac{3}{2}n_x n_{z,z} - \frac{1}{2}n_z n_{z,x}$, а $\overline{x} = \frac{x}{d}$ и $\overline{z} = \frac{z}{d}$ — безразмерные пространственные переменные. В системе уравнений (10)–(12) и в последующем изложении черта над безразмерной функцией тока ψ и безразмерными пространственными переменными x и z опущена. Выражения для функций $\mathscr{F} = \left(\sigma_{xx}^{\mathrm{el}} + \sigma_{xx}^{\mathrm{tm}} - \sigma_{zz}^{\mathrm{el}} - \sigma_{zz}^{\mathrm{tm}}\right)_{,xz} + \left(\sigma_{zx}^{\mathrm{el}} + \sigma_{zx}^{\mathrm{tm}}\right)_{,zz} - \left(\sigma_{xz}^{\mathrm{el}} + \sigma_{xz}^{\mathrm{tm}}\right)_{,xx}$, $\sigma_{ij}^{\mathrm{tm}}$ $(i,j = x,z)$ и $\sigma_{ij}^{\mathrm{el}}$ $(i,j = x,z)$, а также коэффициентов a_i $(i = 1,\ldots,12)$ приведены в Приложении. Система уравнений (10)–(12) характеризуется набором параметров $K_{31} = \frac{K_3}{K_1}$, $\gamma_{21} = \frac{\gamma_2}{\gamma_1}$, $\Lambda = \lambda_\parallel/\lambda_\perp$, $\delta_1 = \frac{t_T K_1}{\gamma_1 d^2}$, $\delta_2 = \frac{\rho C_p T_{\mathrm{NI}}}{\lambda_\perp}\frac{\xi}{\gamma_1}$, $\delta_3 = \frac{\rho d^2}{\gamma_1 t_T}$, $\delta_4 = \frac{\xi}{\lambda_\perp t_T}$ и $\delta_5 = \frac{2\alpha}{\pi\Delta^2}\frac{d^2}{\lambda_\perp T_{\mathrm{NI}}}\mathscr{O}_0$.

Переориентация, под действием градиента температуры $\nabla\chi$, поля директора и скорости в микролитровом

ГОЖК-объеме ограниченным одной нижней, двумя вертикальными стенками и сверху, в начальный момент, плоской свободной поверхностью может быть описана системой нелинейных дифференциальных уравнений в частных производных (10)–(12) и дополненной граничными и начальными условиями как для поля директора и функции тока, так и для поля температуры. Так, на твердых поверхностях эти условия могут быть записаны в виде

$$(n_x)_{x=\pm 10,\,-1\le z\le 1}=0,\quad (n_x)_{-10\le x\le 10,\,z=-1}=1,$$
$$\chi_{x=\pm 10,\,-1\le z\le 1}=0.97,\quad \chi_{-10\le x\le 10,\,z=-1}=0.97,$$
$$(\psi_{,x})_{x=\pm 10,\,-1\le z\le 1}=(\psi_{,z})_{x=\pm 10,\,-1\le z\le 1}=0,$$
$$(\psi_{,x})_{-10\le x\le 10,\,z=-1}=(\psi_{,z})_{-10\le x\le 10,\,z=-1}=0, \tag{13}$$

в то время как на свободной границе раздела ЖК-фаза/воздух эти условия принимают вид

$$(\mathbf{n}\nabla\chi)_{z=H}=0,\quad (\mathbf{n}\boldsymbol{\nu})_{z=H}=-1,\quad \hat{\mathbf{B}}\boldsymbol{\Psi}=\mathbf{C}. \tag{14}$$

Последнее уравнение является результатом решения системы уравнений (8) относительно трех безразмерных компонент градиента поля скорости $\vec{\boldsymbol{\Psi}}=(\psi_{,xx},\psi_{,xz},\psi_{,zz},)$. Выражение для матрицы $\mathscr{B}$ и вектора $\mathbf{C}$ даны в Приложении, а начальные условия могут быть записаны в виде

$$\hat{\mathbf{n}}(\tau=0,x,z)=\hat{\mathbf{n}}_{\rm el}(x,z),\quad \psi(\tau=0,x,z)=0,$$
$$\chi(\tau=0,x,z)=0.97. \tag{15}$$

В уравнении (15) $\hat{\mathbf{n}}_{\rm el}(x,z)$ есть распределение упругого гибридного поля директора, удовлетворяющее уравнению

$$n_z\mathscr{M}_{0,x}-n_x\mathscr{M}_{0,z}+K_{31}\left(n_z f_{,z}+n_x f_{,x}\right)=0, \tag{16}$$

и граничным условиям

$$(n_x)_{x=\pm 10,\,-1\le z\le 1}=(n_x)_{-10\le x\le 10,\,z=1}=0,$$
$$(n_x)_{-10\le x\le 10,\,z=-1}=1. \tag{17}$$

Решение системы (10)–(12) с граничными и начальными условиями (14)–(17) следует дополнить условием для определения профиля деформированной границы раздела ЖК-фаза/воздух

$$H_{,\tau}+(\psi_{,x})_{z=H}+(\psi_{,z})_{z=H}H_{,x}=0. \tag{18}$$

Дальнейший анализ был проведен для случая ЖК-системы образованной цианобифинилом 5ЦБ при температуре 300 K и плотности $\rho=10^3\,\mathrm{kg/m^3}$. При температуре 300 K значения коэффициентов Франка K_1 и K_3 были выбраны равными 8.7 [pN] и 10 [pN] [15], в то время как значения коэффициентов γ_1 и γ_2 были выбраны равными 0.069 [Pa · s] и −0.083 [Pa · s] [16] соответственно. Значения величин шести коэффициентов Лесли (в [Pa · s] [16]) равны: $\alpha_1\sim-0.0066$, $\alpha_2\sim-0.076$, $\alpha_3\sim-0.007$, $\alpha_4\sim0.072$, $\alpha_5\sim0.048$ и $\alpha_6\sim-0.03$ соответственно. Для коэффициентов теплопроводности в ЖК-системе образованной цианобифинилом 5ЦБ были выбраны следующие значения (в [W/m · K] [17]): $\lambda_\parallel=0.24$ и $\lambda_\perp=0.13$ соответственно, а величина теплоемкости равна [18] $C_p\sim10^3$ [J/kg · K]. В дальнейших расчетах была выбрана следующая величина поверхностного натяжения на границе раздела ЖК-фаза/воздух [19] $\gamma\sim0.02$ [N/m], а величина коэффициента абсорбции α, для случая лазерного излучения с длиной волны в 1061 [nm], равна 8 [m^{-1}] [20]. В наших расчетах толщина $2d$ ЖК-ячейки равна 10 [μm], а величина термомеханической постоянной ξ была оценена в [21] как ~1 pK/N. Таким образом, безразмерные параметры системы (10)–(12) имеют следующие значения: $\delta_1\sim10^{-3}$, $\delta_2\sim0.3$, $\delta_3\sim10^{-6}$ и $\delta_4\sim10^{-4}$. Принимая во внимание тот факт, что безразмерная температура χ находится в пределах $[0.97-1.0)$, величину параметра δ_5 можно оценить как $\delta_5\sim7.0$. Эта оценка $\delta_5=\frac{2\alpha}{\pi\Delta^2}\frac{d^2}{\lambda_\perp T_{\rm NI}}\mathscr{O}_0$ основывается на том, что продолжительность лазерного импульса мощностью в $\mathscr{V}_0\sim0.5$ W, была $t_{\rm in}\sim2.0\,\mu$s, а размер лазерного пятна был выбран равным $\Delta=0.5\,\mu$m. Далее, принимая во внимание тот факт, что $\delta_3\ll1$, уравнение (11) может быть переписано в виде

$$a_1\psi_{,zzzz}+a_2\psi_{,xzzz}+a_3\psi_{,xxzz}+a_4\psi_{,xxxz}+a_5\psi_{,xxxx}$$
$$+a_6\psi_{,zzz}+a_7\psi_{,xzz}+a_8\psi_{,xxz}+a_9\psi_{,xxx}$$
$$+a_{10}\psi_{,zz}+a_{11}\psi_{,xz}+a_{12}\psi_{,zz}+\mathscr{F}=0. \tag{19}$$

3. Деформация свободной поверхности ЖК-канала и формирование вихревых потоков

Процесс формирования вихревых потоков, а также переориентации поля директора и формирование градиента температуры в узком ЖК-канале под действием лазерного излучения интенсивностью $\mathscr{V}_0=0.5$ W и продолжительностью $2.0\,\mu$s описывается системой нелинейных дифференциальных уравнений в частных производных (10), (11) и (19) с учетом граничных (13)–(14) и начальных (15) условий. Система уравнений была решена методом релаксации [22] и сеточным методом [23]. Был изучен режим прогревания ЖК-фазы лазерным излучением мощностью $\mathscr{V}_0=0.5$ W сфокусированным вблизи границы раздела ЖК-фаза/воздух на глубину $x_0=0.0$, $z_0=0.93$, или $\sim0.7\,\mu$m вглубь ЖК-фазы от свободной поверхности и продолжительностью $t_{\rm in}\sim2.0\,\mu$s. В начальный момент времени, с помощью уравнения (16), граничного условия (17) и условия отсутствия скорости $u=w=0$, было рассчитано поле температуры соответствующее $\hat{\mathbf{n}}_{\rm el}(x,z)$, что позволило также рассчитать функцию $\mathscr{F}$, компоненты матрицы $\mathscr{B}_{ij}$ и вектора $\mathbf{C}$. Располагая начальными распределениями поля директора

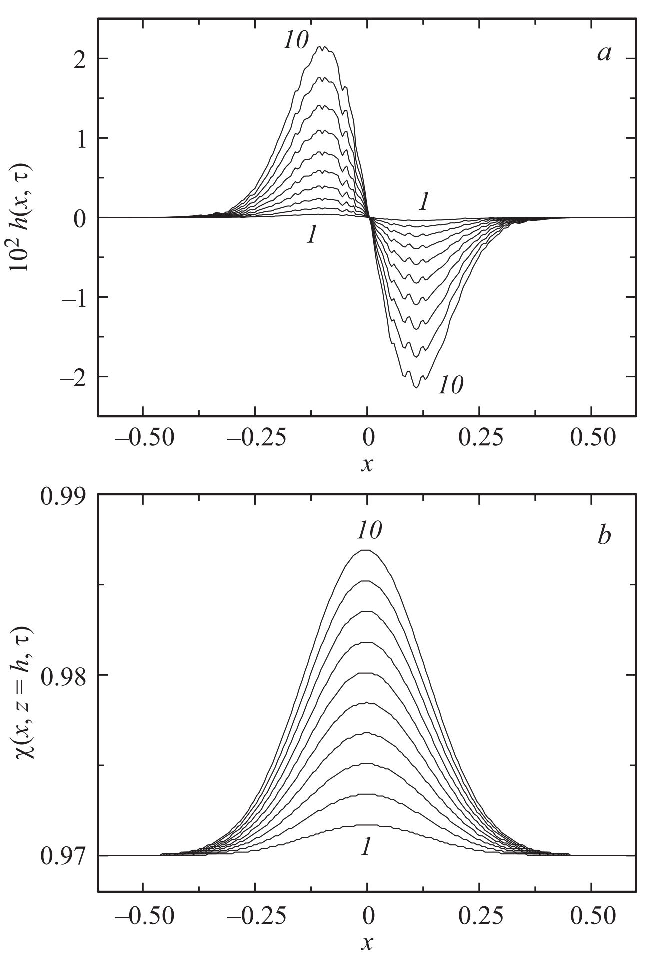

Рис. 1. Эволюция безразмерных профилей деформации свободной поверхности ЖК-фазы $h(x, \tau)$ (a) и температуры $\chi(x, \tau)$ (b) по длине ЖК-канала $-10 \leq x \leq 10$ в процессе его разогрева лазерным лучом мощностью 0.5 W и продолжительностью $2\,\mu$s, сфокусированным в точке $x_0 = 0.0$, $z_0 = 0.93$. Результаты даны для 10 значений времени $\tau_i = 2^i \cdot 10^{-5}$ $(i = 1, \ldots, 10)$.

$\hat{\mathbf{n}}_{\mathrm{el}}(x, z)$ и температуры $\chi\,(x, z, \Delta\tau)$, соответствующими моменту времени $\Delta\tau$, было рассчитано распределение функции тока $\psi\,(x, z, \Delta\tau)$. Следующий шаг по времени $\Delta\tau$ для распределения поля скорости, температуры и поля директора по сечению ЖК-образца со свободной поверхностью был осуществлен с помощью сеточного метода [23], причем устойчивость численной процедуры определялась из условия

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

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

где Δx и Δz — приращения пространственных переменных, а коэффициенты a_1 и a_5 приведены в Приложении. Условием сходимости итерационной процедуры была выбрана величина $\epsilon = |(\chi_{(m+1)}(x, z, \tau) - \chi_{(m)}(x, z, \tau))/\chi_{(m)}(x, z, \tau)| \sim 10^{-4}$, и итерационная процедура продолжалась вплоть до достижения заданной точности $\epsilon \sim 10^{-4}$. Здесь m — число итераций. На рис. 1, a представлены результаты расчета безразмерного профиля деформации свободной границы раздела ЖК-фаза/воздух $h(x, \tau) = H(x, \tau) - 1$ по длине ЖК-канала $-10 \leq x \leq 10$, соответствующие первым 10 значениям времени $\tau_i = 2^i \cdot 10^{-5}$ $(i = 1, \ldots, 10)$. При этом время инжекции лазерного излучения мощностью $\mathscr{V}_0 = 0.5$ W и сфокусированного вблизи границы раздела ЖК-фаза/воздух на $\sim 0.7\,\mu$m вглубь 10 микронной ЖК-фазы было продолжительностью $t_{\mathrm{in}} \sim 2.0\,\mu$s. Расчеты показывают, что в процессе разогрева изначально плоская свободная граница раздела ЖК-фаза/воздух деформируется сильнее всего вблизи точек $x = \pm 0.125$, и приобретает „волнообразный“ профиль, причем максимальная высота гребня „волны“ достигает значения $|h(x \sim \pm 1, \tau_{\mathrm{in}} = \tau_{10} = 0.01)| \sim 0.02$, т.е., $\sim 2\%$ от толщины ЖК-слоя. На рис. 1, b представлены результаты расчетов эволюции распределения безразмерной температуры $\chi_{z=H}(x, \tau)$ по длине ЖК-канала $-10 \leq x \leq 10$, соответствующие тем же значениям времени что и на рис. 1, a. Расчеты свидетельствуют о том, что прогревание ЖК-объема носит локальный характер ($\sim 1.5\%$ от всего объема ЖК-фазы) и максимальная температура разогрева ЖК-фазы $\chi(x = 0.0)_{z=H} \sim 0.987$ (~ 307 K) достигается спустя $\tau_{\mathrm{in}} = \tau_{10} = 0.01$ ($\sim 2\,\mu$s). Эволюция безразмерных профилей компонент скорости $\mathbf{v}_{z=H} = u_{z=H}\hat{\mathbf{i}} + w_{z=H}\hat{\mathbf{k}}$ на свободной поверхности ЖК-фазы, соответствующих тем же значениям времени что и на рис. 1, a, представлены на рис. 2, a, b. Эволюция горизонтальной u и вертикальной w составляющих

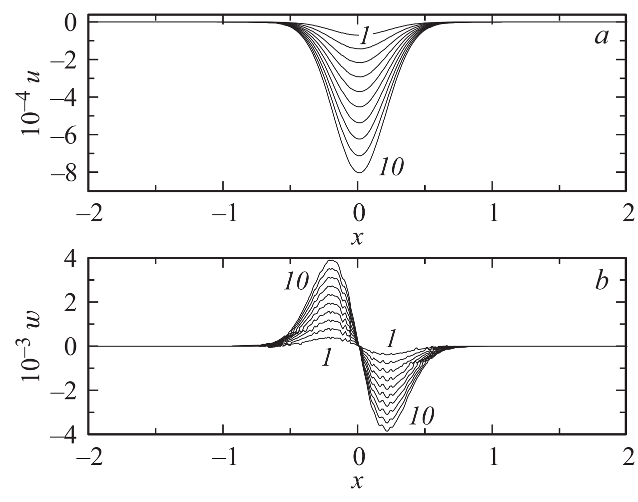

Рис. 2. Эволюция безразмерных профилей горизонтальной $u(x, \tau)_{z=H}$ (a) и вертикальной $w(x, \tau)_{z=H}$ (b) компонент вектора скорости на свободной поверхности ЖК-фазы по длине ЖК-канала $-10 \leq x \leq 10$ в процессе его разогрева лазерным лучом мощностью 0.5 W и продолжительностью $2\,\mu$s, сфокусированным в точке $x_0 = 0.0$, $z_0 = 0.93$. Времена те же что на рис. 1.

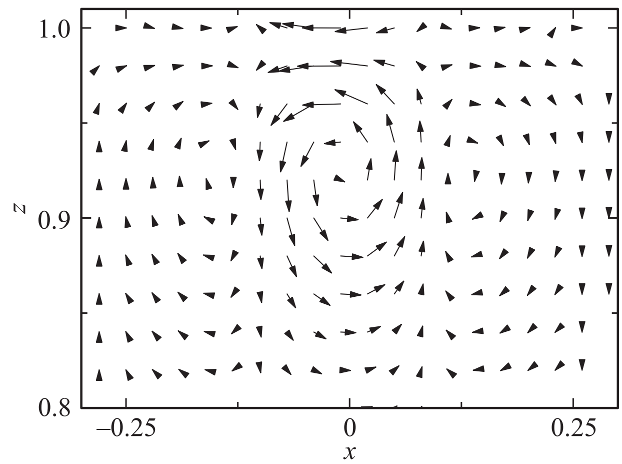

Рис. 3. Распределение поля скорости $\mathbf{v} = u\hat{\mathbf{i}} + w\hat{\mathbf{k}}$ в объеме ЖК-фазы вблизи фокуса лазерного излучения. 1 mm длины стрелки соответствует $0.4\,\mu$m/s.

вектора скорости в процессе разогрева ЖК-фазы свидетельствует о том, что вблизи свободной границы формируются три вихря: один крупный, вращающийся против часовой стрелки, и два мелких, вращающихся по часовой стрелке соответственно (см. рис. 3). Координаты центра первого вихря $x = 0.0$, $z = 0.93$, в то время как координаты центров двух других вихрей $x = \pm 0.125$, $z = 0.93$ соответственно. Расчеты показывают, что наибольшее значение горизонтальной составляющей скорости $u \sim 8 \cdot 10^{-3}$ ($\sim 0.27\,\mu$m/s) достигается в точке $x = 0.0$, $z \sim 1.0$ и скорость направлена в сторону левого конца ЖК-канала ($x = -10$), в то время как максимальное значение вертикальной составляющей скорости $w \sim 4 \cdot 10^{-4}$ (~ 13.2 nm/s) направленой в положительном смысле достигается в точке $x = -0.13$, $z \sim 1.0$, а в отрицательном смысле вблизи точки $x = 0.13$, $z \sim 1.0$ соответственно. Расчеты также свидетельствуют о том, что в вихревой поток, создаваемый лазерным излучением мощностью $\mathcal{V}_0 = 0.5$ W и продолжительностью $t_{\text{in}} \sim 2.0\,\mu$s, вовлечена незначительная область ЖК-фазы ограниченная размерами $-0.3 \le x \le 0.3$, $0.8 \le z \le 1.0$, или $\sim 1.2\%$ всего объема ЖК-фазы. Следует отметить, что ограничения налагаемые на энергетические параметры лазерного излучения вытекают из небольшого температурного интервала существования нематической фазы образованной молекулами 5ЦБ.

С момента выключения лазерного излучения начинается процесс охлаждения ЖК-фазы $\chi_{z=H}(x, \tau)$ (см. рис. 4, b) и, как следствие, уменьшение характера деформации свободной границы раздела ЖК-фаза/воздух $h(x, \tau)$ (см. рис. 4, a), а также затухание вихревого потока (рис. 5, a, b). На рис. 4–5 показана эволюция вышеописанных характеристик и компонент вектора скорости $u_{z=H}(x, \tau)$ и $w_{z=H}(x, \tau)$ по длине ЖК-канала $-10 \le x \le 10$, соответствующих последующим 8 значениям времени $\tau_i = 2^i \cdot 10^{-2}$ ($i = 1, \ldots, 8$). Вихревой поток в ЖК-канале полностью затухает спустя время $\tau_8 \sim 2.56$ (~ 0.5 s) после выключения лазерного излучения. При этом как температурный профиль $\chi(x, \tau)$, так и $h(x, \tau)$ в процессе охлаждения сдвигаются в

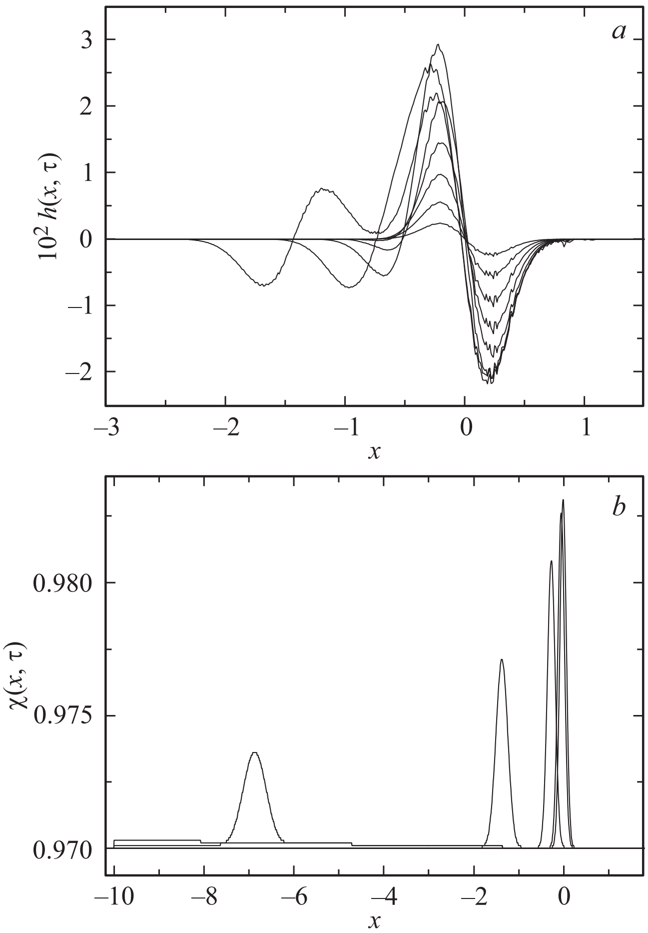

Рис. 4. То же что на рис. 1, но для процесса охлаждения ЖК-фазы. Результаты даны для 8 значений времени $\tau_i = 2^i \cdot 10^{-2}$ ($i = 1, \ldots, 8$).

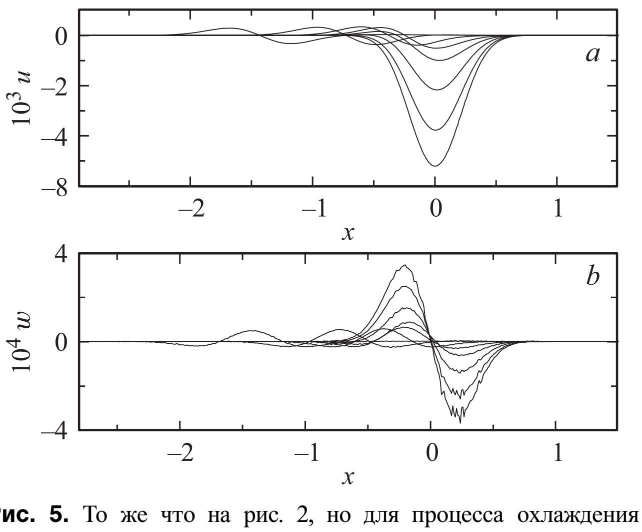

Рис. 5. То же что на рис. 2, но для процесса охлаждения ЖК-фазы. Времена те же что на рис. 4.

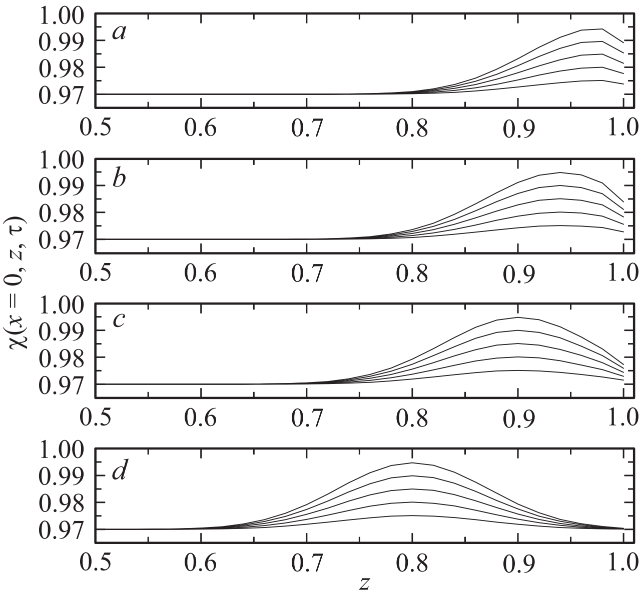

Рис. 6. Распределение значений безразмерной температуры $\chi(x = 0.0, z, \tau)$ по сечению ЖК-канала $0.6 \leq z \leq 1.0$ в процессе его разогрева лазерным лучом мощностью 0.5 W и продолжительностью $2\,\mu$s, сфокусированному в точке $x_0 = 0.0$, а глубина фокусировки варьировалась от значения $z_0 = 0.98$ (a) до 0.94 (b), и далее до 0.90 (c), и заканчивая значением 0.80 (d). Результаты даны для 5 значений времени $\tau_i = 2^i \cdot 10^{-5}$ ($i = 6, \ldots, 10$).

левую сторону ЖК-канала, что вызвано существованием относительно большой горизонтальной составляющей u вектора скорости направленной в сторону левого края ЖК-канала (см. рис. 5, a). На рис. 6 приведено распределение безразмерной температуры $\chi(x = 0, z, \tau)$ вдоль вертикальной оси $0.5 \leq z \leq 1.0$, когда лазерный луч мощностью $\mathcal{V}_0 = 0.5$ W и продолжительностью $\tau_{\text{in}} = 0.01$ направлен в точку $x_0 = 0.0$. Результаты даны для 5 значений времени $\tau_i = 2^i \cdot 10^{-5}$ ($i = 6, \ldots, 10$). При этом глубина фокусировки лазерного излучения менялась от величины $z_0 = 0.98$ (a) до $z_0 = 0.94$ (b), далее $z_0 = 0.90$ (c), и заканчивая $z_0 = 0.80$ (d) соответственно.

Результаты расчетов указывают на слабую зависимость профилей соответствующих распределений температуры по указанной толщине ЖК-материала от глубины фокусировки лазерного излучения. Так, например, для случая $z_0 = 0.80$ мощности лазерного излучения $\mathcal{V}_0 = 0.5$ W не хватает на то, чтобы за время $\tau_{\text{in}} = \tau_{10} = 0.01$ прогретая область, где $\chi > \chi_{\text{boundary}} = 0.97$, достигла бы свободной поверхности ЖК-фазы. На рис. 7–8 приведены результаты расчета профилей безразмерных горизонтальной $u(x = 0, z, \tau)$ (рис. 7) и вертикальной $w(x = 0, z, \tau)$ (рис. 8) компонент вектора скорости вдоль вертикальной оси $0.7 \leq z \leq 1.0$, когда лазерный луч мощностью $\mathcal{V}_0 = 0.5$ W направлен в точку $x_0 = 0.0$. Здесь значения времени те же что и на рис. 6. Показано, что по мере того, как фокус лазерного излучения смещается вглубь ЖК-материала, направление горизонтальной компоненты вектора скорости $u(x = 0.0, z, \tau)$ меняет знак с отрицательного на положительный, примерно на глубине $z_0 = 0.90$. При этом, направление вертикальной составляющей вектора скорости $w(x = 0.0, z, \tau)$ не меняется в течении всех расчетных значений времени $\tau_i = 2^i \cdot 10^{-5}$ ($i = 6, \ldots, 10$) и величина этой скорости

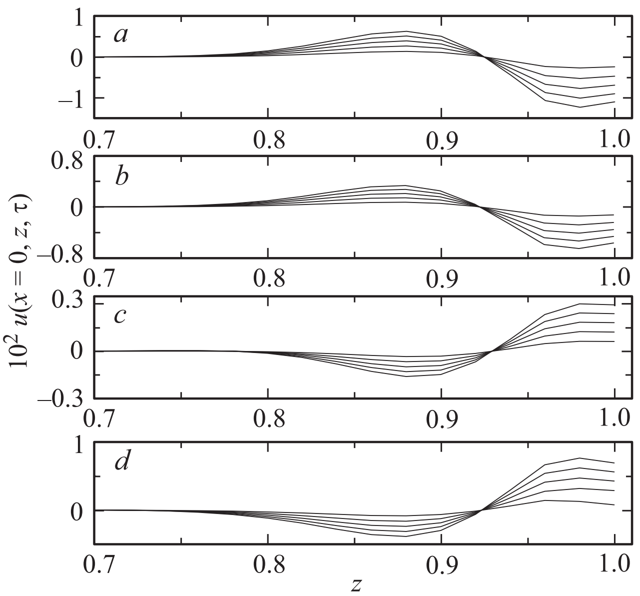

Рис. 7. Распределение безразмерной горизонтальной u ($x = 0.0, z, \tau$) компоненты вектора скорости по сечению ЖК-канала $0.7 \leq z \leq 1.0$ в процессе его разогрева лазерным лучом. Остальные значения те же что на рис. 6.

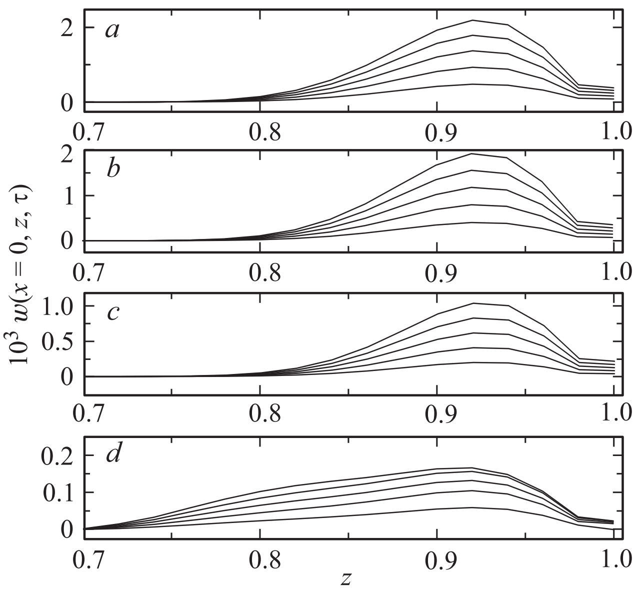

Рис. 8. То же что на рис. 7, но для распределения безразмерной вертикальной w ($x = 0.0, z, \tau$) компоненты вектора скорости по сечению ЖК-канала $0.7 \leq z \leq 1.0$ в процессе его разогрева лазерным лучом.

быстро стремится к нулю, по мере приближения к свободной поверхности ЖК-фазы.

Таким образом, расчеты показывают, что изменяя глубину фокусировки лазерного излучения можно добиться изменения направления и величины вихревых потоков в микролитровых ЖК-объемах и, тем самым, добиться необходимой транспортировки ЖК-капель помещенных в микроразмерные каналы или капилляры [5].

4. Заключение

Анализ полученных результатов касающихся эволюции поля директора, скорости и температуры в ЖК-каналах со свободной поверхностью под действием лазерного излучения показал, что в рамках нелинейного обобщения классической теории Эриксена-Лесли, допускающей учет термомеханических вкладов в выражения для компонент тензора напряжений и баланса моментов сил действующих на единицу объема ЖК-фазы, возможно описание зарождения и формирования вихревых потоков в этих микрометровых ЖК-каналах. Было обнаружено, что в процессе разогрева ЖК-канала лазерным излучением допустимой мощности произошла незначительная переориентация поля директора, повлекшая за собой формирование локального вихревого течения в ЖК-канале. Было также показано, что изменяя глубину фокусировки лазерного излучения можно добиться изменения направления и величины вихревых потоков в микролитровых ЖК-объемах. Все это позволяет надеяться на то, что локальный разогрев ЖК-фазы посредством лазерного излучения является удобным инструментом для транспортировки ЖК-капель помещенных в микроразмерные каналы или капилляры, что указывает на то, что существует возможность немеханической транспортировки или сортировки микролитровых объемов ЖК-фазы под действием сфокусированного лазерного излучения.

Исследованные в работе особенности, связанные с реакцией ЖК-материалов на локализованное воздействие градиента температуры и градиента поля директора, необходимо учитывать при создании разнообразных сенсоров и датчиков используемых в биотехнологических приложениях, медицине и фармокологии, а также в иммерсионной литографии.

5. Приложение

Безразмерные компоненты тензора напряжений имеют вид

$$\sigma_{xx}^{\mathrm{el}} = \delta_1\left[-n_{x,x}\mathscr{M}_0 + K_{31} f n_{z,x}\right],$$

$$\sigma_{zz}^{\mathrm{el}} = \delta_1\left[-n_{x,x}\mathscr{M}_0 + K_{31} f n_{z,z}\right],$$

$$\sigma_{xz}^{\mathrm{el}} = \delta_1\left[-n_{x,x}\mathscr{M}_0 - K_{31} f n_{x,x}\right],$$

$$\sigma_{zx}^{\mathrm{el}} = \delta_1\left[-n_{x,x}\mathscr{M}_0 - K_{31} f n_{x,z}\right],$$

$$\sigma_{xx}^{\mathrm{vis}} = \gamma_{21} n_x \frac{dn_x}{dt} + \psi_{,xz}\frac{1}{\gamma_1}\left[\alpha_4 + (\alpha_5+\alpha_6)n_x^2 + \alpha_1 n_x^2\left(n_x^2 - n_z^2\right)\right] + \frac{\alpha_1}{\gamma_1} n_x^3 n_z\left(\psi_{,zz} - \psi_{,xx}\right) - \frac{1}{2}\gamma_{21} n_x n_z\left(\psi_{,zz} + \psi_{,xx}\right),$$

$$\sigma_{xz}^{\mathrm{vis}} = \frac{1}{2}\left(n_z\frac{dn_x}{dt} - n_x\frac{dn_z}{dt}\right) + \frac{1}{2}\gamma_{21}\left(n_z\frac{dn_x}{dt} + n_x\frac{dn_z}{dt}\right) + \psi_{,xz}\frac{1}{\gamma_1}\left[\alpha_1 n_x n_z\left(n_x^2 - n_z^2\right) + \gamma_2 n_x n_z\right] + \frac{1}{\gamma_1}\left(\psi_{,zz} - \psi_{,xx}\right)\left[\alpha_1 n_x^2 n_z^2 + \frac{\alpha_4}{2} + \frac{\alpha_5+\alpha_6}{4}\right] - \frac{1}{4}\left(\psi_{,zz} + \psi_{,xx}\right) + \frac{1}{2}\gamma_{21}\psi_{,xx}\left(n_x^2 - n_z^2\right),$$

$$\sigma_{zx}^{\mathrm{vis}} = \frac{1}{2}\left(n_x\frac{dn_z}{dt} - n_z\frac{dn_x}{dt}\right) + \frac{1}{2}\gamma_{21}\left(n_z\frac{dn_x}{dt} + n_x\frac{dn_z}{dt}\right) - \psi_{,xz}\frac{1}{\gamma_1}\left[\alpha_1 n_x n_z\left(n_z^2 - n_x^2\right) + \gamma_2 n_x n_z\right] + \frac{1}{\gamma_1}\left(\psi_{,zz} - \psi_{,xx}\right)\left[\alpha_1 n_x^2 n_z^2 + \frac{\alpha_4}{2} + \frac{\alpha_5+\alpha_6}{4}\right] + \frac{1}{4}\left(\psi_{,zz} + \psi_{,xx}\right) + \frac{1}{2}\gamma_{21}\psi_{,zz}\left(n_x^2 - n_z^2\right),$$

$$\sigma_{zz}^{\mathrm{vis}} = \gamma_{21} n_z\frac{dn_z}{dt} - \psi_{,xz}\frac{1}{\gamma_1}\left[\alpha_4 + (\alpha_5+\alpha_6)n_z^2 + \alpha_1 n_z^2\left(n_z^2 - n_x^2\right)\right] + \alpha_1 n_z^3 n_x\left(\psi_{,zz} - \psi_{,xx}\right) + \frac{1}{2}\gamma_{21} n_x n_z\left(\psi_{,zz} + \psi_{,xx}\right),$$

$$\sigma_{xx}^{\mathrm{tm}} = \delta_1\chi_{,x}\left[\frac{1}{2}M_{xx}n_x\left(3n_x^2 + 7\right)M_{xz}n_z\left(1 + \frac{7}{2}n_x^2\right) + M_{zz}n_x\left(\frac{3}{2} + 2n_z^2\right)\right] + \delta_1\chi_{,z}\left[M_{xx}n_z\left(n_x^2 + 1\right) + \frac{1}{2}M_{xz}n_x\left(3 + 5n_z^2\right) + \frac{3}{2}M_{zz}n_z\left(1 + n_z^2\right)\right],$$

$$\sigma_{xz}^{\mathrm{tm}} = \delta_1\chi_{,x}\left[\frac{1}{2}M_{xx}n_z\left(n_x^2 + 3\right) + M_{xz}n_x\left(3n_z^2 - \frac{1}{2}\right) + M_{zz}n_z^3\right] + \delta_1\chi_{,z}\left[\frac{1}{2}M_{xx}n_x - \frac{1}{2}M_{xz}n_z\left(3 - n_x^2\right) - \frac{1}{2}M_{zz}n_x n_z^2\right],$$

$$\sigma_{zx}^{\mathrm{tm}} = \delta_1\chi_{,x}\left[-\frac{1}{2}M_{xx}n_z n_x^2 + \frac{1}{2}M_{xz}n_x\left(3 - n_z^2\right) + \frac{1}{2}M_{zz}n_z\right] + \delta_1\chi_{,z}\left[M_{xx}n_x^3 + \frac{1}{2}M_{xz}n_z\left(3n_x^2 - 1\right) + \frac{1}{2}M_{zz}n_x\left(1 + n_z^2\right)\right],$$

$$\sigma_{zz}^{\text{tm}} = \delta_1 \chi_{,x} \left[\frac{3}{2} M_{xx} n_x (n_x^2 + 1) + M_{xz} n_z (3 + 5n_x^2) + M_{zz} n_x (1 + n_z^2) \right] + \delta_1 \chi_{,z} \left[M_{xx} n_z \left(2n_x^2 + \frac{3}{2} \right) + M_{xz} n_x \left(1 + \frac{7}{2} n_z^2 \right) + \frac{1}{2} M_{zz} n_z (7 + 3n_z^2) \right].$$

Коэффициенты a_i $(i = 1, \dots 12)$ уравнения (11) имеют вид

$$a_1 = \frac{1}{2} + \frac{1}{\gamma_1} \left[\frac{\alpha_4}{2} + \frac{\alpha_5 + \alpha_6}{4} + \alpha_1 n_x^2 n_z^2 \right] + \frac{\gamma_{21}}{2} (n_x^2 - n_z^2) - \frac{\gamma_{21}^2}{4} (n_x^2 - n_z^2)^2,$$

$$a_2 = -\frac{2}{\gamma_1} [\alpha_1 n_x n_z (n_z^2 - n_x^2) + \gamma_2 n_x n_z] + 2\gamma_{21}^2 n_x n_z (n_x^2 - n_z^2),$$

$$a_3 = 1 + \frac{1}{\gamma_1} \left[\alpha_4 + \frac{\alpha_5 + \alpha_6}{2} - \alpha_1 (n_x^4 + n_z^4) \right] - 4\gamma_{21}^2 n_x^2 n_z^2 + \frac{1}{2} \gamma_{21}^2 (n_x^2 - n_z^2),$$

$$a_4 = \frac{2}{\gamma_1} [\alpha_1 n_x n_z (n_z^2 - n_x^2) - \gamma_2 n_x n_z] - 2\gamma_{21}^2 n_x n_z (n_x^2 - n_z^2),$$

$$a_5 = \frac{1}{2} + \frac{1}{\gamma_1} \left[\frac{\alpha_4}{2} + \frac{\alpha_5 + \alpha_6}{4} + \alpha_1 n_x^2 n_z^2 \right] - \frac{\gamma_{21}}{2} (n_x^2 - n_z^2) - \frac{\gamma_{21}^2}{4} (n_x^2 - n_z^2)^2,$$

$$a_6 = \frac{1}{\gamma_1} \left[\left(\alpha_1 + \frac{\gamma_2^2}{\gamma_1} \right) n_x n_z (n_x^2 - n_z^2) + 2\gamma_2 n_x n_z \right]_{,x} + \frac{1}{\gamma_1} \left[\alpha_1 n_x^2 n_z^2 + \frac{\gamma_2}{2} (n_x^2 - n_z^2) \right]_{,z} - \frac{\gamma_{21}^2}{4} [(n_x^2 - n_z^2)^2]_{,z},$$

$$a_7 = -\frac{2}{\gamma_1} [\alpha_1 n_x n_z (n_x^2 - n_z^2) + \gamma_2 n_x n_z]_{,z} - \frac{1}{\gamma_1} \left[\alpha_1 (n_x^2 - n_z^2)^2 + 4 \frac{\gamma_2^2}{\gamma_1} n_x^2 n_z^2 \right]_{,x} + \frac{1}{4} [1 + \gamma_{21} (n_x^2 - n_z^2)]_{,x}^2 + 2\gamma_{21}^2 [n_x n_z (n_x^2 - n_z^2)]_{,z},$$

$$a_8 = \frac{1}{\gamma_1} \left[\left(-\alpha_1 + \frac{\gamma_2^2}{4\gamma_1} \right) (n_z^2 - n_x^2)^2 - \left(2\alpha_1 + \frac{4\gamma_2^2}{\gamma_1} \right) n_x^2 n_z^2 \right]_{,z} + \frac{2}{\gamma_1} \left[\left(\alpha_1 + \frac{\gamma_2^2}{\gamma_1} \right) (n_z^2 - n_x^2) n_x n_z - \gamma_2 n_x n_z \right]_{,x},$$

$$a_9 = \frac{1}{\gamma_1} \left[-\left(\alpha_1 + \frac{\gamma_2^2}{\gamma_1} \right) n_x n_z (n_x^2 - n_z^2) - 2\gamma_2 n_x n_z \right]_{,z} + \frac{1}{\gamma_1} \left[\alpha_1 n_x^2 n_z^2 - \frac{\gamma_2}{2} (n_x^2 - n_z^2) \right]_{,x} - \frac{\gamma_{21}^2}{4} [(n_x^2 - n_z^2)^2]_{,x},$$

$$a_{10} = \frac{1}{\gamma_1} \left[\alpha_1 n_x^2 n_z^2 + \frac{3\gamma_2}{4} (n_x^2 - n_z^2) \right]_{,zz} - \frac{1}{\gamma_1} \left[\alpha_1 n_x^2 n_z^2 + \frac{\gamma_2}{4} (n_x^2 - n_z^2) \right]_{,xx} + \frac{\gamma_{21}}{4} (n_x^2 - n_z^2) [(n_x^2 - n_z^2)_{,xx} - 2(n_x^2 - n_z^2)_{,zz}] - \left[\frac{\alpha_1}{\gamma_1} n_x n_z (n_z^2 - n_x^2) - \gamma_{21} n_x n_z \right]_{,xz}$$
$$+ \gamma_{21}^2 n_x n_z (n_x^2 - n_z^2)_{,xz} + \gamma_{21}^2 [(n_x n_z)_{,x} (n_x^2 - n_z^2)_{,z} + (n_x n_z)_{,z} (n_x^2 - n_z^2)_{,x}] - \gamma_{21}^2 \left[\frac{1}{4} \left((n_x^2 - n_z^2)_{,z} \right)^2 - \frac{1}{4} \left((n_x^2 - n_z^2)_{,x} \right)^2 \right],$$

$$a_{11} = -\frac{1}{\gamma_1} [\alpha_1 n_x n_z (n_x^2 - n_z^2)]_{,xx} - \frac{1}{\gamma_1} [\alpha_1 n_x n_z (n_x^2 - n_z^2)]_{,zz} - \frac{\alpha_1}{\gamma_1} [(n_x^2 - n_z^2)^2]_{,xz} - \gamma_{21}^2 [n_x n_z (n_z^2 - n_x^2)_{,zz} + (n_x n_z)_{,zz}$$
$$\times (n_x^2 - n_z^2)] \gamma_{21}^2 [-n_x n_z (n_z^2 - n_x^2)_{,xx} + (n_x n_z)_{,xx} (n_x^2 - n_z^2)] + \gamma_{21}^2 [8 n_x n_z (n_z n_x)_{,xz} + 8 (n_z n_x)_{,z} (n_z n_x)_{,x} + (n_z n_x)_{,z} (n_x^2 - n_z^2)_{,x}] + \gamma_{21}^2 [(n_z n_x)_{,x} (n_x^2 - n_z^2)_{,x}],$$

$$a_{12} = \frac{1}{\gamma_1} \left[\alpha_1 n_x^2 n_z^2 - \frac{3\gamma_2}{4} (n_x^2 - n_z^2) \right]_{,xx} + \frac{1}{\gamma_1} \left[\alpha_1 n_x^2 n_z^2 + \frac{\gamma_2}{4} (n_x^2 - n_z^2) \right]_{,zz} + \frac{\gamma_{21}^2}{4} (n_x^2 - n_z^2) [(n_x^2 - n_z^2)_{,zz} - 2(n_x^2 - n_z^2)_{,xx}] - \left[\frac{\alpha_1}{\gamma_1} n_x n_z (n_z^2 - n_x^2) - \gamma_{21} n_x n_z \right]_{,xz}$$
$$- \gamma_{21} (n_x n_z)_{,xz} [1 + \gamma_{21} (n_x^2 - n_z^2)] - \gamma_{21}^2 n_x n_z (n_x^2 - n_z^2)_{,xz} - \gamma_{21}^2 [(n_x n_z)_{,z} (n_x^2 - n_z^2)_{,x} + (n_x n_z)_{,x} (n_x^2 - n_z^2)_{,x}] - \frac{\gamma_{21}^2}{4} \left[\left((n_x^2 - n_z^2)_{,z} \right)^2 - \left((n_x^2 - n_z^2)_{,x} \right)^2 \right].$$

Матрица $\hat{\mathscr{B}}$ и вектор $\mathbf{C}$ имеют следующие элементы b_{ij} $(i, j = 1, 2, 3)$ и c_i $(i = 1, 2, 3)$:

$$b_{11} = (n_x)_{z=H} \left(2\gamma_{21} - \gamma_{21}^2 + \frac{2\alpha_4 + \alpha_5 + \alpha_6 - 2\alpha_1}{2\gamma_1} \right),$$

$$b_{12} = -\frac{\alpha_4 + \alpha_5 + \alpha_6 + \alpha_1}{\gamma_1},$$

$$b_{13} = (n_x)_{z=H} \left(\gamma_{21} + \gamma_{21}^2 - \frac{2\alpha_4 + \alpha_5 + \alpha_6 + 2\alpha_1}{2\gamma_1} \right),$$

$$b_{21} = \frac{1}{4} - \frac{2\alpha_4 + \alpha_5 + \alpha_6}{4\gamma_1},$$

$$b_{22} = (n_x)_{z=H} \left(-\gamma_{21}^2 - \frac{2\alpha_4 + \alpha_5 + \alpha_6 + 2\alpha_1}{\gamma_1} \right),$$

$$b_{23} = \frac{1}{2} - \frac{\gamma_{21}}{2} - \frac{\gamma_{21}^2}{4} + \frac{2\alpha_4 + \alpha_5 + \alpha_6}{4\gamma_1},$$

$$b_{31} = \frac{\gamma_{21} - 1}{2},$$

$$b_{32} = -2\gamma_{21} \left(n_x\right)_{z=H},$$

$$b_{33} = -\frac{\gamma_{21} + 1}{2},$$

$$c_1 = 2\gamma \left(n_{x,x}\right)_{z=H} - \mathscr{P},$$

$$c_2 = \frac{\delta_1}{2} \left(\gamma_{21} - 1\right) \left[3\chi_{,x} \left(n_{x,x}\right)_{z=H} + \chi_{,z} \left(n_{x,z}\right)_{z=H}\right],$$

$$c_3 = \delta_1 \left(\frac{3}{2} \chi_{,x} \left(n_{x,x}\right)_{z=H} + \chi_{,z} \left(n_{x,z}\right)_{z=H}\right).$$

Здесь $\mathscr{P} = \frac{d^2}{K_1} P$ — безразмерное гидростатическое давление в ЖК-системе.

Список литературы

[1] W. Sparreboom, A. van den Berg, J.C.T. Eijkel. New J. Phys. **12**, 0115004 (2010).
[2] T.M. Squires, S.R. Quake. Rev. Mod. Phys. **77**, 977 (2005).
[3] E. Verneuil, M.L. Cordero, F. Gallaire, Ch.N. Baroud. Langmuir **25**, 5127 (2009).
[4] A.V. Zakharov, A.A. Vakulenko. J. Chem. Phys. **127**, 084907 (2007).
[5] A.V. Zakharov, A.A. Vakulenko, Mitsumasa Iwamoto. J. Chem. Phys. **132**, 224906 (2010).
[6] S.J. Woltman, G.D. Jay, G.P. Crawford. Nature Mat. **6**, 929 (2007).
[7] S. Zhou, A. Sokolov, O.D. Lavrentovich, I.S. Aranson. P.N.A.S. **111**, 1265 (2011).
[8] H. Choi, H. Takezoe. Soft Matter. **12**, 481 (2016).
[9] A.V. Zakharov, A.A. Vakulenko. Phys. Fluids **27**, 062001 (2015).
[10] Р.С. Акопян, Б.Я. Зельдович. ЖЭТФ **87**, 1660 (1984).
[11] P.G. de Gennes, J. Prost. The physics of liquid crystals. Oxford Univ. Press, Oxford (1995). 400 p.
[12] J.L. Ericksen. Arch. Ration. Mech. Anal. **4**, 231 (1960).
[13] F.M. Leslie. Arch. Ration. Mech. Anal. **28**, 265 (1968).
[14] С. Гроот, П. Мазур. Неравновесная термодинамика. Мир, М. (1964). 456 с.
[15] N.V. Madhusudana, R.B. Ratibha. Mol. Cryst. Liq. Cryst. **132**, 339 (1986).
[16] A.G. Chmielewski. Mol. Cryst. Liq. Cryst. **132**, 339 (1986).
[17] M. Marinelli, A.K. Ghosh, F. Mercury. Phys. Rev. E **63**, 061713 (2001).
[18] P. Jamee, G. Pitsi, J. Thoen. Phys. Rev. E **66**, 021707 (2002).
[19] A.V. Zakharov, A.A. Vakulenko. Phys. Rev. E **86**, 031701 (2012).
[20] I.-C. Khoo, S.-T. Wu, *Optics and Nonlinear Optics of Liquid Crystal*. World Scientific, Singapure (1993). P. 59.
[21] R.S. Akopyan, R.B. Alaverdian, E.A. Santrosian, Y.S. Chilingarian. J. Appl. Phys. **90**, 3371 (2001).
[22] И.С. Березин, Н.Р. Жидков. Методы вычислений. Физматгиз, М. (1964). 464 с.
[23] А.А. Самарский, Е.С. Николаев. Методы решения сеточных уравнений. Наука, М. (1978) 592 с.

Редактор Ю.Э. Китаев