

14,15

## Сдвиговой режим формирования градиента температуры в тонком нематическом канале

© А.В. Захаров<sup>1</sup>, С.В. Пасечник<sup>2</sup>, Д.В. Шмелева<sup>2</sup>

<sup>1</sup> Институт проблем машиноведения РАН,  
Санкт-Петербург, Россия

<sup>2</sup> Московский технологический университет,  
Москва, Россия

E-mail: alexandre.zakharov@yahoo.ca, s-p-a-s-m@mail.ru, shmeliova@mail.ru

(Поступила в Редакцию 6 ноября 2018 г.

В окончательной редакции 6 ноября 2018 г.

Принята к публикации 7 ноября 2018 г.)

Численными методами, в рамках нелинейного обобщения классической теории Эриксона–Лесли, с учетом баланса энтропии, сформулированы необходимые условия формирования градиента температуры  $\nabla T$  в изначально однородно прогретом микроразмерном гибридно ориентированном жидкокристаллическом (ГОЖК)-канале под действием сдвигового напряжения (СН). Рассмотрены случаи полной и частичной термической изоляции одной из поверхностей ГОЖК-канала при условии, что на другой поверхности поддерживается постоянная температура. Показано, как под действием СН, приложенного к одной из поверхностей этого ГОЖК-канала, можно разогреть планарно ориентированную границу канала и тем самым сформировать градиент температуры по сечению ЖК-канала.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант № 16-02-00041а) и Минобрнауки (гранты 3.11888.2018/11.12 и 3.9585.2017/8.9).

DOI: 10.21883/FTT.2019.04.47430.305

### 1. Введение

Основу многих сенсоров и датчиков используемых в биотехнологических приложениях, медицине и фармакологии составляют термотропные и лиотропные жидкие кристаллы (ЖК) инкапсулированные в микро- и наноскопические объемы [1,2]. Один из способов позволяющий манипулировать такими микроразмерными системами основан на использовании внешнего электрического поля (электрокинетика) [2]. В основу другого способа позволяющего транспортировать микролитровые объемы ЖК-материалов, положено взаимодействие градиентов температуры и поля директора, которое ведет к формированию устойчивого гидродинамического потока в ЖК-материала [3]. Было показано, что необходимым и достаточным условием возникновения направленного горизонтального потока в гибридно-ориентированном ЖК (ГОЖК)-канале, в котором, например, ориентация поля директора на одной из ограничивающих поверхностей планарная, а на другой — гомеотропная, является взаимодействие градиентов температуры и поля директора. Ранее были сформулированы условия необходимые для начала транспортировки ЖК-капель инкапсулированных в микроразмерные каналы и капилляры под действием градиента температуры, создаваемого за счет разности температур на ограничивающих поверхностях [4]. Принимая во внимание тот факт, что такая разновидность ЖК-систем, как лиотропные ЖК, составляют основу многих сложных биологических организмов [5], то возможность манипулирования такими

биосистемами посредством формирования градиентов температуры открывает новые перспективы в биотехнологических приложениях. Было также показано, что в изначально равномерно прогретом ГОЖК-канале под действием горизонтально направленного ЖК-потока с „треугольно-подобным“ профилем скорости  $v_{eq}(z)$  по  $z$ -сечению ЖК-канала, характеризующимся ярко выраженным максимумом вблизи верхней планарно ориентированной поверхности, возможно формирование градиента температуры, направленного поперек микроразмерного ГОЖК-канала. Другими словами, таким направленным гидродинамическим потоком удалось разогреть верхнюю гомеотропно ориентированную ограничивающую поверхность и тем самым сформировать градиент температуры, направленный поперек ГОЖК-канала, микроскопической ширины.

В настоящей работе предлагается описание другого механизма, ответственного за формирование градиента температуры  $\nabla T$  в ЖК-фазе под действием сдвигового напряжения (СН) приложенного к одной из поверхностей ЖК-канала. Этот механизм, повидимому, может быть положен в основу наносенсоров, преобразующих механическую энергию в направленные градиенты температуры. В связи с этим возникает вопрос: при каких условиях возможно формирование  $\nabla T$  в изначально однородно прогретом ЖК-канале под действием сдвигового напряжения приложенного к одной из поверхностей ЖК-канала.

Ответ на этот вопрос будет дан в рамках нелинейного обобщения классической теории Эриксона–Лесли [6,7]

с учетом баланса энтропии [8]. Будет рассмотрен такой температурный режим, когда температура на одной из ограничивающих поверхностях постоянна ( $T_{lw} = \text{const}$ ), а на другой ограничивающей поверхности допускается частичная или полная термическая изоляция. Таким образом, разность температур  $\Delta T = T_{up} - T_{lw}$ , которая в начальный момент времени равна нулю, должна достичь максимально возможного значения, соответствующего существованию нематической фазы, для данной величины СН приложенного к одной из поверхностей ЖК-канала.

## 2. Основные уравнения

Рассмотрим гибридно-ориентированный ЖК-канал, в котором, например, ориентация поля директора на одной из ограничивающих поверхностей планарная ( $\hat{\mathbf{n}}_{z=d} \parallel \hat{\mathbf{i}}$ ), а на другой — гомеотропная ( $\hat{\mathbf{n}}_{z=0} \parallel \hat{\mathbf{k}}$ ). В нашем случае система координат отсчитывается от нижней ограничивающей поверхности ЖК-канала, где ось  $x$  и орт  $\hat{\mathbf{i}}$  совпадают с направлением директора на верхней горизонтальной поверхности, в то время как ось  $z$  и орт  $\hat{\mathbf{k}}$  направлены ортогонально ориентации директора на нижней ограничивающей поверхности ЖК-канала, а орт  $\hat{\mathbf{j}} = \hat{\mathbf{k}} \times \hat{\mathbf{i}}$ . Принимая во внимание тот факт, что ширина ЖК-канала  $d \ll L$ , где  $L$  — длина канала, можно предположить, что все физические величины вовлеченные в процесс формирования градиента температуры  $\nabla T$ , зависят только от пространственной переменной  $z$  и времени  $t$ . Таким образом, вектор поля директора  $\hat{\mathbf{n}} = (n_x, 0, n_z) = n_x \hat{\mathbf{i}} + n_z \hat{\mathbf{k}} = \cos \theta(z, t) \hat{\mathbf{i}} + \sin \theta(z, t) \hat{\mathbf{k}}$  лежит в плоскости  $xOz$ , причем  $\theta(z, t)$  — полярный угол образованный директором  $\hat{\mathbf{n}}$  и ортом  $\hat{\mathbf{k}}$ . Дальнейшее изложение будет дано для случая безразмерной переменной  $\bar{z} = z/d$ , причем верхняя черта над пространственной переменной в дальнейшем будет опущена.

В настоящей работе предлагается новый подход описывающий механизм формирования градиента температуры  $\nabla T$  поперек ГОЖК-канала, под действием СН  $\sigma_{zx}^0$  приложенного к верхней границе ЖК-канала

$$(\sigma_{zx})_{z=1} = \sigma_{zx}^0, \quad (1)$$

когда на нижней ограничивающей поверхности поддерживается постоянная температура

$$T_{z=0} = T_1, \quad (2)$$

а на верхней ограничивающей поверхности допускается полная или частичная термическая изоляция

$$-\lambda_{\perp} (T_{,z})_{z=1} = Q_0. \quad (3)$$

Здесь  $T_{,z} = \frac{\partial T}{\partial z}$ ,  $\lambda_{\perp}$  — коэффициент теплопроводности ЖК-фазы в направлении перпендикулярном направлению директора  $\hat{\mathbf{n}}$ , а  $Q_0$  — поток тепла через верхнюю границу ЖК-канала. Принимая во внимание тот факт, что толщина ЖК-канала варьируется в пределах нескольких

микрометров, будем считать, что плотность ЖК-фазы постоянна по сечению канала ( $\rho = \text{const}$ ). Таким образом, мы имеем дело с несжимаемой ЖК-фазой, и условие несжимаемости принимает вид

$$v_{x,x}(z, t) + v_{z,z}(z, t) = 0, \quad (4)$$

где  $v_x$  и  $v_z$  компоненты вектора скорости  $\mathbf{v}(z, t) = v_x(z, t) \hat{\mathbf{i}} + v_z(z, t) \hat{\mathbf{k}}$ . Последнее условие с учетом отсутствия проскальзывания на нижней границе ЖК-канала

$$(v_x(z, t))_{z=0} = 0, \quad (v_z(z, t))_{z=0} = 0, \quad (5)$$

приводит к тому, что в несжимаемой ГОЖК-канале существует только один гидродинамический поток, направленный параллельно ограничивающим поверхностям  $\mathbf{v}(z, t) = v_x(z, t) \hat{\mathbf{i}} = u(z, t) \hat{\mathbf{i}}$ . В свою очередь, граничное условие для поля директора может быть записано в виде

$$\theta_{z=0} = 0, \quad \theta_{z=1} = \frac{\pi}{2}. \quad (6)$$

Прежде всего следует отметить, что в отсутствии внешних полей устанавливается линейное распределение поля директора  $\theta(z) = \frac{\pi}{2} z$  по сечению ЖК-канала. Под действием СН  $\sigma_{zx}^0$  приложенного к верхней границе канала в ЖК-фазе устанавливаются балансы угловых моментов и импульсов действующих на единицу объема ЖК-фазы, а также баланс энтропии. Так баланс угловых моментов, записанный в безразмерной форме, принимает вид [3]

$$\begin{aligned} \gamma_1(\chi)\theta_{,\tau} - \mathcal{A}(\theta)u_{,z} - (\mathcal{G}(\theta)\theta_{,z})_{,z} + \frac{1}{2} \mathcal{G}_{\theta}(\theta)\theta_{,z}^2 \\ + \delta_1 \theta_{,z} \chi_{,z} \left( \frac{1}{2} + \sin^2 \theta \right) = 0, \end{aligned} \quad (7)$$

где  $\chi(z, \tau) = T(z, \tau)/T_{NI}$  — безразмерная температура,  $\gamma_1 = \frac{\bar{\gamma}}{\gamma_{10}}$  — безразмерный коэффициент вращательной вязкости,  $T_{NI}$  — значение температуры, соответствующее переходу нематик–изотропная жидкость,  $\mathcal{A}(\theta) = \frac{\bar{\mathcal{A}}(\theta)}{K_{10}}$  и  $\mathcal{G}(\theta) = \frac{\bar{\mathcal{G}}(\theta)}{K_{10}}$  — безразмерные функции полярного угла  $\theta$ ,  $\gamma_{10}$  и  $K_{10}$  — максимальные значения коэффициентов  $\gamma_1$  и  $K_1$  в интервале температур, соответствующих нематической фазе,  $\bar{\mathcal{A}}(\theta) = \frac{1}{2} (\gamma_1 - \gamma_2 \cos 2\theta)$ ,  $\bar{\mathcal{G}}(\theta) = K_1 \sin^2 \theta + K_3 \cos^2 \theta$ ,  $K_1$  и  $K_3$  — коэффициенты упругости Франка, соответствующие поперечным и продольным деформациям,  $\gamma_i$  ( $i = 1, 2$ ) — коэффициенты вращательной вязкости, а  $\tau = \frac{K_{10}}{\gamma_{10} d^2} t$  — безразмерное время. Здесь  $\delta_1 = \xi \frac{T_{NI}}{K_{10}}$  — параметр ЖК-системы. Первые два члена в уравнении (7) описывают вклад вязкой силы, в то время как следующие два члена — вклад упругой силы в баланс моментов действующих на единицу объема ЖК-фазы. Последний член представляет собой вклад термомеханической силы в баланс моментов [3]. Безразмерные уравнения баланса импульсов и энтропии имеют вид [3]

$$\delta_2 u_{,\tau}(z, \tau) = \sigma_{zx,z}, \quad (8)$$

$$\mathcal{P}_{,z}(z, \tau) + \frac{\delta \mathcal{R}}{\delta \theta_{, \tau}} \theta_{,z} = 0, \quad (9)$$

$$\delta_3 \chi_{,z}(z, \tau) = \left[ \chi_{,z} \left( \lambda \cos^2 \theta + \sin^2 \theta \right) \right]_{,z} + \delta_4 \left[ \chi \theta_{,z} \left( \theta_{, \tau} \left( \frac{1}{2} + \sin^2 \theta \right) - \frac{3}{2} u_{,z} \sin^2 \theta \right) \right]. \quad (10)$$

Здесь  $\delta_2 = \frac{\rho K_{10}}{\gamma_{10}^2}$ ,  $\delta_3 = \frac{\rho C_p K_{10}}{\gamma_{10} \lambda_{\perp}}$  и  $\delta_4 = \xi \frac{K_{10}}{\gamma_{10} \lambda_{\perp} d^2}$  — еще три параметра ЖК-системы, в то время как  $\lambda = \lambda_{\parallel} / \lambda_{\perp}$ ,  $C_p$  — коэффициент теплоемкости ЖК-фазы, а  $\xi \sim 10^{-12}$  [J/m K] — термомеханическая постоянная [9]. Выражение для тангенциальной составляющей тензора напряжений  $\sigma_{zx}$  имеет вид

$$\sigma_{zx} = \frac{\delta \mathcal{R}}{\delta u_{,z}} = h(\theta) u_{,z} - \mathcal{A}(\theta) \theta_{, \tau} - \frac{3}{2} \delta_1 \chi_{,z} \theta_{,z} \sin^2 \theta, \quad (11)$$

а  $\mathcal{R} = \frac{\gamma_{10} d^4}{K_{10}^2} \overline{\mathcal{R}}$  — полная безразмерная диссипационная функция (ДФ) Релея [3,6,7], которая имеет вид  $\mathcal{R} = \mathcal{R}_{\text{vis}} + \mathcal{R}_{\text{tm}} + \mathcal{R}_{\text{th}}$ , где  $\mathcal{R}_{\text{vis}} = \frac{1}{2} h(\theta) u_{,z}^2 - \mathcal{A}(\theta) \theta_{, \tau} u_{,z} + \frac{1}{2} \gamma_1 \theta_{, \tau}^2$  — вязкий,  $\mathcal{R}_{\text{tm}} = \delta_1 \chi_{,z} \theta_{, \tau} \theta_{,z} \left( \frac{1}{2} + \sin^2 \theta \right) - \frac{3}{2} \delta_1 \chi_{,z} \theta_{,z} u_{,z} \sin^2 \theta$  — термомеханический и  $\mathcal{R}_{\text{th}} = \frac{1}{2\chi} \times (\lambda \cos^2 \theta + \sin^2 \theta)$  — термический вклады в ДФ Релея соответственно. В уравнении (9),  $\mathcal{P}(z, \tau) = \frac{d^2}{K_{10}} P(z, \tau)$  — безразмерное гидростатическое давление в ЖК-канале, которое состоит из двух вкладов: вязкого вклада, определяемого величиной  $\int_0^z \frac{\partial \mathcal{R}(z, \tau)}{\partial \theta_{, \tau}} \theta_{,z} dz$ , и упругого вклада, определяемого потенциалом Франка  $\frac{1}{2} \mathcal{E}(\theta) \theta_{,z}^2$ .

Таким образом, формирование градиента температуры по сечению ГОЖК-канала, в котором верхняя граница полностью или частично термически изолирована и к которой приложено СН  $\sigma_{zx}^0$ , а на нижней поверхности поддерживается постоянная температура, описывается системой нелинейных дифференциальных уравнений в частных производных (7)–(10), и дополненных граничными условиями как для поля температуры

$$\chi_{z=0} = \chi_1, \quad (\chi_{,z})_{z=1} = q_0, \quad (12)$$

так и поля директора

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

где  $q_0 = -\frac{Q_0 d}{T_{\text{NI}} \lambda_{\perp}}$  — безразмерный тепловой поток через верхнюю границу ЖК-канала.

В случае ЖК-системы, образованной молекулами 4-*n'*-октил-*n'*-цианофенила (8ЦБ), температурный интервал существования нематической фазы соответствует  $307 \leq T \leq T_{\text{NI}} \sim 313.8$  К. В этом интервале температур величины параметров  $\delta_1 \sim 24$ ,  $\delta_2 \sim 2 \cdot 10^{-6}$ ,  $\delta_3 \sim 6 \cdot 10^{-4}$ , и  $\delta_4 \cdot 10^{-10}$  соответственно. Поэтому

с учетом того, что  $\delta_i \ll 1$  ( $i = 2, 3, 4$ ), уравнения Навье–Стокса (8) и теплопроводности (10) упрощаются. Так уравнения (8) и (10) принимают вид

$$h(\theta) u_{,z} - \mathcal{A}(\theta) \theta_{, \tau} - \frac{3}{2} \delta_1 \chi_{,z} \theta_{,z} \sin^2 \theta = \sigma_{zx}^0, \quad (14)$$

$$\left[ \chi_{,z} \left( \lambda \cos^2 \theta + \sin^2 \theta \right) \right]_{,z} = 0. \quad (15)$$

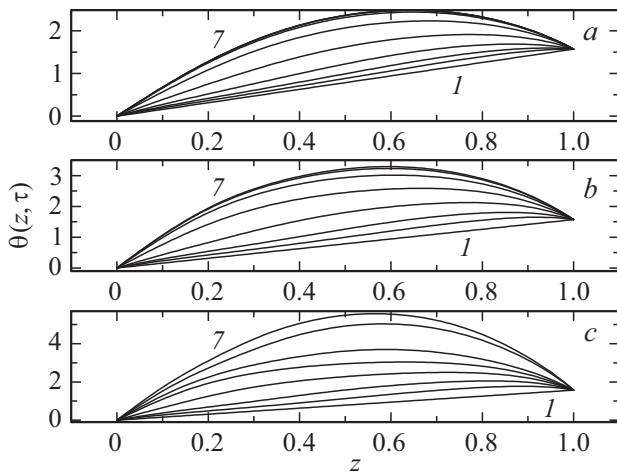
Из уравнения (15) непосредственно следует, что градиент температуры, формирующийся по сечению ЖК-канала, пропорционален потоку тепла  $q_0$  через верхнюю границу канала

$$\chi_{,z}(z) = \frac{q_0}{\lambda \cos^2 \theta + \sin^2 \theta}. \quad (16)$$

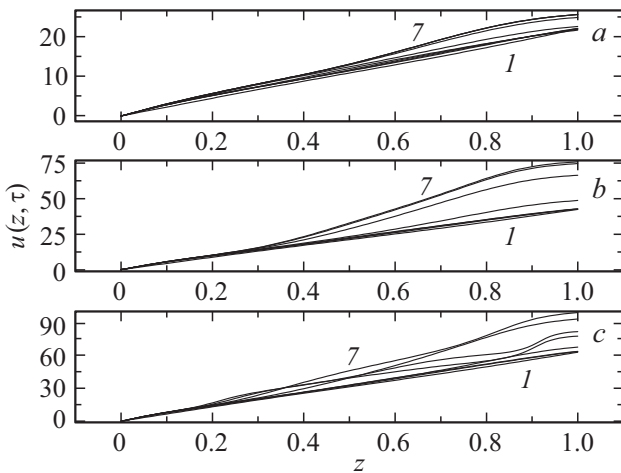
Таким образом, из уравнения (16) следует, что в ГОЖК-канале с термически изолированной верхней границей градиент температуры  $\chi_{,z}(z) = 0$ , и вся механическая энергия СН  $\sigma_{zx}^0$  диссипирует так, что в ЖК-канале генерируется гидродинамический поток  $u(z, \tau)$ , направленный параллельно ограничивающим поверхностям и вызывающий переориентацию поля директора  $\theta(z, \tau)$ . В случае частичной термической изоляции верхней границы ЖК-канала, подразумевающей наличие теплового потока  $q_0$  внутрь либо из канала, по сечению ЖК-канала формируется градиент температуры, величина которого пропорциональна величине  $q_0$ , а его направление зависит от того, в какую сторону направлен тепловой поток.

### 3. Решение гидродинамических уравнений и основные результаты

Процесс переориентации поля директора  $\hat{\mathbf{n}}(z, \tau)$ , описываемый углом  $\theta(z, \tau)$ , перераспределение поля температуры  $\chi(z, \tau)$  и формирование горизонтального потока  $u(z, \tau)$  в ГОЖК-канале под действием СН  $\sigma_{zx}^0$  приложенного к верхней границе канала описывается системой нелинейных дифференциальных уравнений в частных производных (14) и (16) совместно с граничными условиями (12)–(13) и начальными условиями для угла  $\theta(\tau = 0) = \frac{\pi}{2}$  и скорости  $u(\tau = 0) = 0$  соответственно. Формирование разности температур по сечению ГОЖК-канала под действием СН  $\sigma_{zx}^0$  приложенного к верхней границе было исследовано численно методом релаксаций [10], а критерием сходимости итерационной процедуры был выбран  $\epsilon = |(\theta_{m+1} - \theta_m) / \theta_m| \sim 10^{-4}$ . Здесь  $m$  — номер итерации. Как уже было отмечено выше, при отсутствии СН  $\sigma_{zx}^0$  в ГОЖК-канале устанавливается линейное  $\theta(z) = \frac{\pi}{2} z$  распределение поля директора, так, что на нижней границе  $\theta_{z=0} = 0$  и директор соориентирован гомеотропно, в то время как на верхней границе  $\theta_{z=1} = \frac{\pi}{2}$  и директор соориентирован планарно. Как только к верхней границе приложено СН  $\sigma_{zx}^0$ , то происходит переориентация поля директора, и распределение угла  $\theta(z, \tau)$  эволюционирует к его равновесному распределению  $\theta_{\text{eq}}(z)$  по сечению ЖК-канала.



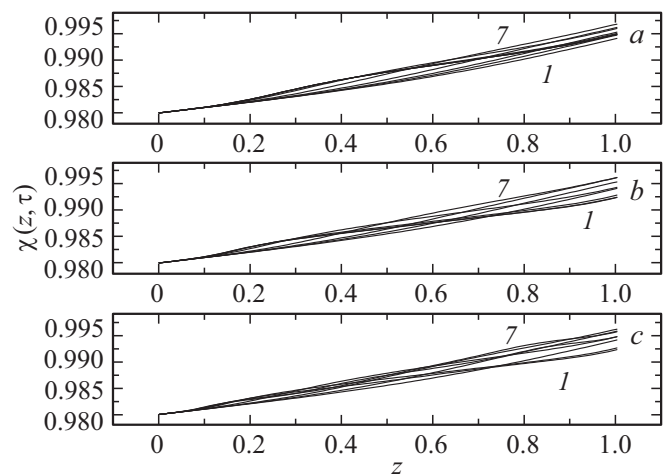
**Рис. 1.** Релаксация полярного угла  $\theta(z, \tau)$  к равновесному распределению  $\theta_{\text{eq}}(z)$  по сечению ГОЖК-канала, соответствующему кривой 7, под действием СН  $\sigma_{zx}^0 = 10$  (a), 20 (b) и 30 (c) соответственно.



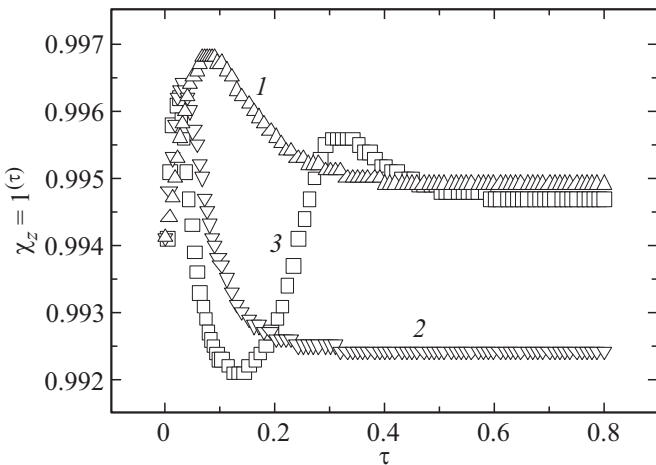
**Рис. 2.** Эволюция безразмерной скорости  $u(z, \tau)$  к ее равновесному распределению  $u_{\text{eq}}(z)$  по сечению ГОЖК-канала, соответствующему кривой 7, под действием СН  $\sigma_{zx}^0 = 10$  (a), 20 (b) и 30 (c) соответственно.

На рис. 1 представлены результаты расчета эволюции полярного угла  $\theta(z, \tau)$  к его равновесному распределению  $\theta_{\text{eq}}(z)$  по сечению ГОЖК-канала для трех значений СН:  $\sigma_{zx}^0 = 10$  ( $\sim 5$  Па) (случай I) (рис. 1, a), 20 ( $\sim 10$  Па) (случай II) (рис. 1, b) и 30 ( $\sim 15$  Па) (случай III) (рис. 1, c) соответственно, причем величина теплового потока равна  $q_0 = 0.02$ , что соответствует величине размерного теплового потока  $Q_0 = 200 \text{ mW}/\mu\text{m}^2$ , направленного во внутрь через верхнюю границу ЖК-канала. Следует отметить, что величина размерного теплового потока  $Q_0$  подобрана таким образом, чтобы вариации температуры соответствовали области существования нематической фазы. Во всех трех случаях (I, II, III) начальная ориентация поля директора характеризуется линейным распределением  $\theta(z) = \frac{\pi}{2} z$

по сечению канала. Кривые 1–7, рис. 1 представляют собой решения вышеописанной системы уравнений соответствующие следующим временам:  $\tau_1 = 0.001$  (кривые 1),  $\dots \tau_7 = \tau_R$  (кривые 7). Так в случае  $\sigma_{zx}^0 = 10$ ,  $\tau_R = 0.4$  ( $\sim 0.07$  s), 20,  $\tau_R = 0.32$  ( $\sim 0.055$  s) и 30,  $\tau_R = 0.6$  ( $\sim 0.1$  s) соответственно. Согласно нашим расчетам, в случаях I, II, и III, в ГОЖК-канале формируется гидродинамический поток  $u(z, \tau)$  направленный вдоль канала (см. рис. 2), причем максимальная величина  $u_{\text{eq}}(\text{III}) \sim 95$  ( $\sim 2.871$  mm/s), практически в 4 раза больше максимального значения  $u_{\text{eq}}(\text{I}) \sim 25$  ( $\sim 0.787$  mm/s). Во всех этих трех случаях (I, II, III), под действием гидродинамического потока, обусловленного СН  $\sigma_{zx}^0$ , начальная ориентация поля директора претерпевает такое изменение, что поле директора в середине ГОЖК-канала закручивается практически на один оборот ( $\theta_{\text{eq}}(z = 0.5)(\text{III}) \sim 6$  ( $\sim 344^\circ$ ), относительно орта  $\hat{j}$ ). В случае такого теплового потока, как  $Q_0 = 200 \text{ mW}/\mu\text{m}^2$ , направленного во внутрь через верхнюю границу ЖК-канала, спустя время  $t_R(\text{I}) \sim 0.07$  s ( $\tau_R(\text{I}) \sim 0.4$ ) устанавливается равновесное распределение поля температуры по сечению ЖК-канала (кривая 7, рис. 3, a), характеризующееся тем, что на нижней границе ( $z = 0$ ) поддерживается постоянная температура  $T_{z=0} = 307$  K ( $\chi_{z=0}^{\text{eq}} = 0.98$ ), в то время как на верхней границе устанавливается окончательная температура  $T_{z=1}^{\text{eq}} = 311.5$  K ( $\chi_{z=1}^{\text{eq}} = 0.995$ ), для случая I, и  $T_{z=1}^{\text{eq}} = 311.3$  K ( $\chi_{z=1}^{\text{eq}} = 0.9946$ ), для случая III соответственно. Таким образом, наибольшая разница  $\Delta\chi = \chi_{\text{max}} - \chi_{\text{min}} = 0.015$  ( $\sim 4.5$  K в ГОЖК-канале формируется в случае I. Следует отметить, что с ростом величины СН  $\sigma_{zx}^0$  с 10 ( $\sim 5$  Па) (случай I) до 30 ( $\sim 15$  Па) (случай III), максимальная величина угла  $\theta$  возрастает с  $\theta_{\text{max}}(z \sim 0.6) \sim 3.0$  ( $\sim 172^\circ$ ), в случае I, до  $\theta_{\text{max}}(z \sim 0.6) \sim 6.0$  ( $\sim 344^\circ$ ), в случае III. Такое поведение угла  $\theta$  физически обосновано, поскольку



**Рис. 3.** Релаксация безразмерного поля температуры  $\chi(z, \tau)$  к его равновесному распределению  $\chi_{\text{eq}}(z)$  по сечению ГОЖК-канала, соответствующему кривой 7, под действием СН  $\sigma_{zx}^0 = 10$  (a), 20 (b) и 30 (c) соответственно.

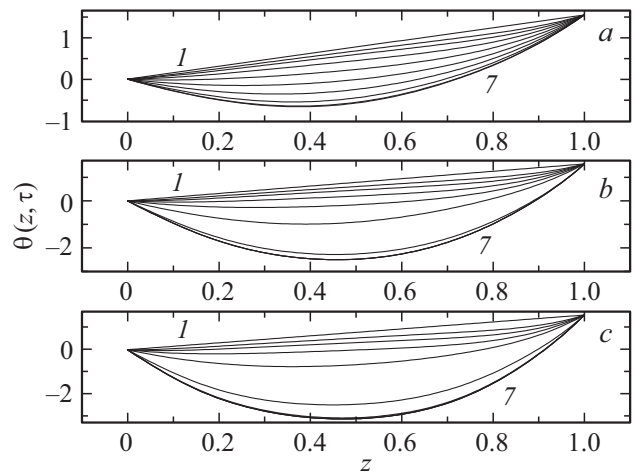


**Рис. 4.** Эволюция безразмерной температуры  $\chi_{z=1}(\tau)$  на верхней границе ГОЖК-канала под действием СН  $\sigma_{zx}^0 = 10$  (кривая 1), 20 (кривая 2) и 30 (кривая 3) соответственно.

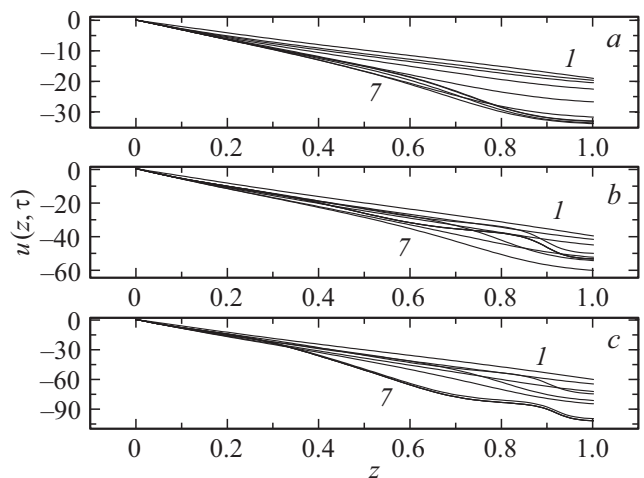
гидродинамическое течение сильнее отклоняет директор в середине ЖК-канала чем вблизи границ, где директор жестко соориентирован. В свою очередь, как только в ГОЖК-канале формируется гидродинамический поток  $u(z, \tau)$  и происходит переориентация поля директора, по сечению канала начинает формироваться разность температур  $\Delta\chi = \chi_{\max} - \chi_{\min}$ . Здесь  $\chi_{\min} \equiv \chi_{z=0}$ . Результаты расчета эволюции  $\chi_{\max}(\tau) \equiv \chi_{z=1}(\tau)$  к равновесному значению  $\chi_{\max}^{\text{eq}}$ , для трех величин СН  $\sigma_{zx}^0$ , с 10 (~ 5 Pa) (случай I) до 30 (~ 15 Pa) (случай III), представлены на рис. 4. Было установлено, что величина СН  $\sigma_{zx}^0$  слабо влияет на величину равновесной максимальной температуры  $\chi_{\max}^{\text{eq}}$  формирующейся на верхней границе ЖК-канала.

Наши расчеты показали, что с изменением направления СН с положительного ( $\sigma_{zx}^0 > 0$ ) на отрицательное ( $\sigma_{zx}^0 < 0$ ) характер переориентации поля директора претерпевает как качественное, так и количественное изменение (см. рис. 5). В случае, когда СН  $\sigma_{zx}^0 = -10$  (~ -5 Pa) (случай IV) (рис. 5, a), начальная ориентация поля директора, характеризующаяся линейной зависимостью полярного угла  $\theta(z) = \frac{\pi}{2}z$  по сечению ГОЖК-канала, претерпевает такое изменение, что поле директора вблизи нижней границы канала переориентируется в отрицательном направлении, характеризующимся отрицательными значениями угла  $\theta(z, \tau)$  (см. рис. 5, a). По мере переориентации поля директора, для случая I, минимальные значения полярного угла  $\theta(z, \tau)$  достигают величины  $\theta_{\text{eq}}(z \sim 0.4) \sim -0.6$  (~ -34.4°), а область отрицательных значений  $\theta$  простирается до  $z \sim 0.7$ . С ростом величины СН  $\sigma_{zx}^0 < 0$  с -10 до -30 (случай VI) (рис. 5, c), область отрицательных значений угла  $\theta$  расширяется до  $z \sim 0.9$  (случай VI (см. рис. 5, c), а минимальное значение полярного угла  $\theta(z, \tau)$  достигают величины  $\theta_{\text{eq}}(z \sim 0.5) \sim -3.0$  (~ -172°). Такая сложная картина переориентации поля директора

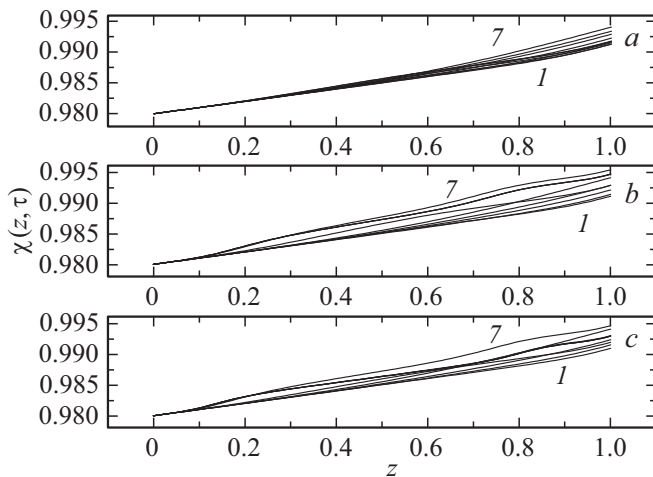
осуществляется под действием как гидродинамического потока, обусловленного СН  $\sigma_{zx}^0 < 0$ , так и термомеханической силы, обусловленной формирующимся градиентом температуры. Эволюция распределения поля скорости  $u(z, \tau)$  по сечению ГОЖК-канала для трех величин СН  $\sigma_{zx}^0$ , -10 (случай IV), -20 (случай V), и -30 (случай VI), представлена на рис. 6, a, b и c соответственно. Времена релаксаций поля директора во всех трех случаях имеют следующие значения: в случае IV,  $\tau_R = 0.64$  (~ 0.11 s), V,  $\tau_R = 0.47$  (~ 0.08 s) и VI,  $\tau_R = 0.48$  (~ 0.08 s) соответственно. Таким образом, наши расчеты показали, что генерируемое СН  $\sigma_{zx}^0$  поле скорости  $u(z, \tau)$  оказывает сильное влияние на процесс переориентации поля директора. Так в случае VI, в центральной части ГОЖК-канала ( $z \sim 0.5$ ) ди-



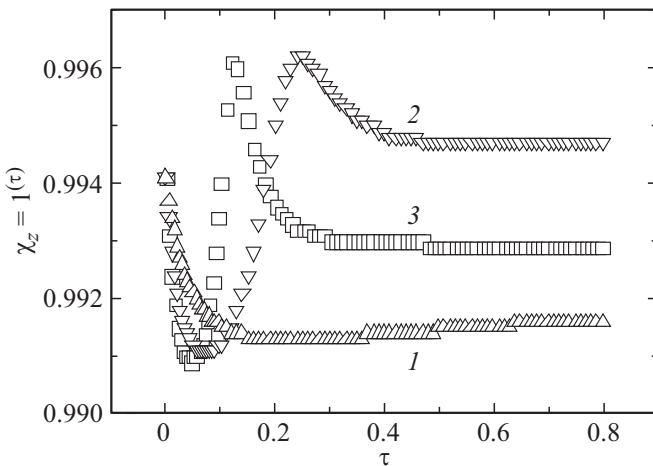
**Рис. 5.** Релаксация полярного угла  $\theta(z, \tau)$  к равновесному распределению  $\theta_{\text{eq}}(z)$  по сечению ГОЖК-канала, соответствующему кривой 7, под действием СН  $\sigma_{zx}^0 = -10$  (a), -20 (b) и -30 (c) соответственно.



**Рис. 6.** Эволюция безразмерной скорости  $u(z, \tau)$  к ее равновесному распределению  $u_{\text{eq}}(z)$  по сечению ГОЖК-канала, соответствующему кривой 7, под действием СН  $\sigma_{zx}^0 = -10$  (a), -20 (b) и -30 (c) соответственно.



**Рис. 7.** Релаксация безразмерного поля температуры  $\chi(z, \tau)$  к его равновесному распределению  $\chi_{\text{eq}}(z)$  по сечению ГОЖК-канала, соответствующему кривой 7, под действием СН  $\sigma_{zx}^0 = -10$  (a),  $-20$  (b) и  $-30$  (c) соответственно.

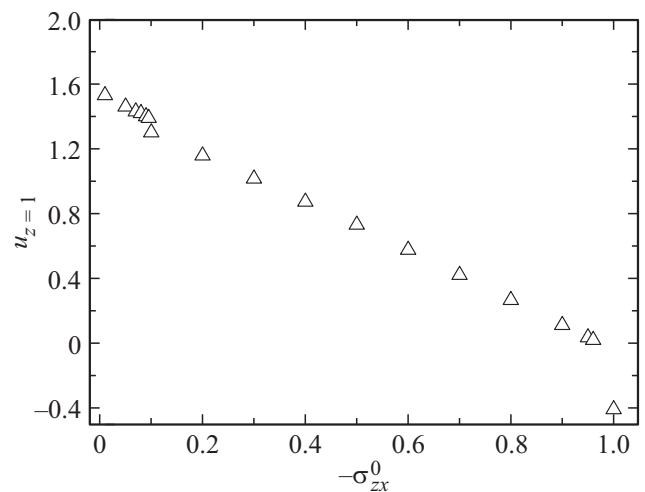


**Рис. 8.** Эволюция безразмерной температуры  $\chi_{z=1}(\tau)$  на верхней границе ГОЖК-канала под действием СН  $\sigma_{zx}^0 = -10$  (кривая 1),  $-20$  (кривая 2) и  $-30$  (кривая 3) соответственно.

ректор соориентирован практически ортогонально границам ЖК-канала ( $\theta_{\text{eq}}(z \sim 0.5) \sim -3.0$  ( $\sim -172^\circ$ ) (см. рис. 5, c)). Процесс релаксации поля скорости характеризуется монотонным ростом величины  $|u(z, \tau)|$  по мере приближения к равновесному распределению  $|u_{\text{eq}}(z)|$  по сечению ГОЖК-канала. Максимальное абсолютное значение скорости  $|u_{\text{eq}}(z) = \frac{\gamma_{10d}}{K_{10}} v_{\text{eq}}(z)|$ , в случае IV, равно 33 (1 mm/s), в случае V, равно 60.4 (1.86 mm/s) и в случае VI, равно 102 (3.14 mm/s) соответственно. В случае отрицательного СН  $\sigma_{zx}^0$ ,  $-10$  (случай IV),  $-20$  (случай V), и  $-30$  (случай VI), на рис. 7, a, b и c, представлены эволюции поля температуры  $\chi(z, \tau)$  к их равновесным распределениям  $\chi_{\text{eq}}(z)$  по сечению ГОЖК-канала. В случае IV, мы имеем дело практически с линейной зависимостью  $\chi(z, \tau)$  от пространственной переменной  $z$ ,

и слабой нелинейностью этой зависимости с ростом абсолютной величины  $|\sigma_{zx}^0|$ . Для всех трех случаев IV, V и VI, равновесное распределение температуры по сечению ГОЖК-канала характеризуется тем, что на нижней границе ( $z = 0$ ) поддерживается постоянная температура  $T_{z=0} = 307$  K ( $\chi_{z=0}^{\text{eq}} = 0.98$ ), в то время как на верхней границе устанавливается окончательная температура  $T_{z=1}^{\text{eq}} = 310.4$  K ( $\chi_{z=1}^{\text{eq}} = 0.992$ ) (см. рис. 7, a), для случая IV,  $T_{z=1}^{\text{eq}} = 311.3$  K ( $\chi_{z=1}^{\text{eq}} = 0.9945$ ) (см. рис. 7, b), для случая V и  $T_{z=1}^{\text{eq}} = 310.8$  K ( $\chi_{z=1}^{\text{eq}} = 0.993$ ) (см. рис. 7, c), для случая VI соответственно. Таким образом, наибольшая разница  $\Delta\chi = \chi_{\text{max}} - \chi_{\text{min}} = 0.0145$  ( $\sim 4.35$  K) в ГОЖК-канале формируется в случае V. Результаты расчета эволюции  $\chi_{\text{max}}(\tau) \equiv \chi_{z=1}(\tau)$  к равновесному значению  $\chi_{\text{max}}^{\text{eq}}$ , для трех величин СН  $\sigma_{zx}^0$ , с  $-10$  ( $\sim -5$  Pa) (случай IV) до  $-30$  ( $\sim -15$  Pa) (случай VI), представлены на рис. 8. Было установлено, что и в этом случае абсолютная величина СН  $|\sigma_{zx}^0|$  слабо влияет на величину равновесной максимальной температуры  $\chi_{\text{max}}^{\text{eq}}$  формирующейся на верхней границе ЖК-канала.

Следует отметить, что вышеописанные режимы формирования градиента температуры в ГОЖК-канале, под действием СН  $\sigma_{zx}^0$  приложенного к верхней границе канала, при условии частичной термической изоляции верхней границы ( $q_0 \neq 0$ ) и поддержания постоянной температуры на нижней границе ( $T_{z=0} = T_1$ ) ЖК-канала, были описаны при условии отсутствия проскальзывания ЖК-материала на нижней границе канала (см. ур. (5)). В свою очередь, анализ поведения распределения скоростей ( $u(z, \tau)$ ) по сечению ГОЖК-канала показал, что абсолютная величина скорости  $|u(z, \tau)_{z=1}|$  на верхней границе канала убывает с уменьшением абсолютной величины СН  $|\sigma_{zx}^0|$  (см. рис. 2 и 6). Такая зависимость  $u(z, \tau)_{z=1}(\sigma_{zx}^0)$  указывает на то, что при частичной термической изоляции верхней границы ЖК-канала, суще-



**Рис. 9.** Зависимость безразмерной гидродинамической скорости  $u_{z=1}(z)$  на верхней границе ГОЖК-канала от величины СН  $\sigma_{zx}^0$  при фиксированном тепловом потоке  $q_0 = 0.02$ , направленном во внутрь ЖК-канала.

ствует такое значение  $\text{СН } \sigma_{zx}^0$  при котором отсутствует проскальзывание и на верхней границе ГОЖК-канала, т. е.  $u_{z=1} = 0$ . На рис. 9 представлены результаты расчета величины гидродинамической скорости на верхней границе ГОЖК-канала  $u_{z=1}$  в зависимости от приложенного  $\text{СН } \sigma_{zx}^0$ . Установлено, что с ростом абсолютной величины  $\text{СН } \sigma_{zx}^0$  приложенного в отрицательном направлении к верхней границе ЖК-канала, величина скорости  $u_{z=1}$  убывает и вектор скорости  $\mathbf{v}_{z=1} = u(z, t)_{z=1} \hat{\mathbf{i}}$  меняет направление при значениях  $\sigma_{zx}^0 \sim -0.97$  ( $\sim -0.5 \text{ Pa}$ ). При этом тепловой поток  $q_0 = 0.02$  ( $Q_0 = 200 \text{ mW}/\mu\text{m}^2$ ) был направлен во внутрь ЖК-канала.

#### 4. Заключение

В предлагаемой работе численными методами, в рамках нелинейного обобщения классической теории Эриксона–Лесли, с учетом баланса энтропии, сформулированы необходимые условия формирования градиента температуры  $\nabla T$  в изначально однородно прогретом микроразмерном гибридно-ориентированном жидкокристаллическом (ГОЖК)-канале под действием сдвигового напряжения ( $\text{СН}$ ) приложенного к одной из поверхностей этого канала. Рассмотрены случаи полной и частичной термической изоляции одной из поверхностей ГОЖК-канала при условии, что на другой поверхности поддерживается постоянная температура. Показано, как под действием  $\text{СН}$  можно разогреть планарно ориентированную границу ГОЖК-канала и тем самым сформировать градиент температуры, по сечению ЖК-канала. Величина  $\nabla T$  пропорциональна величине теплового потока, направленного через верхнюю границу канала.

Следует отметить, что ранее было сформулировано условие формирования  $\nabla T$  в ГОЖК-канале под действием стационарного, горизонтально направленного гидродинамического потока [11]. Было показано, что формирование  $\nabla T$  возможно лишь в случае полной термической изоляции верхней гомеотропно ориентированной границы ГОЖК-канала, в то время как на нижней границе должна поддерживаться постоянная температура. Численными методами было показано, что этот механизм формирования градиента температуры в ГОЖК-канале реализуется только лишь под действием гидродинамического потока со специфическим профилем скорости и при условии существования градиента поля директора.

В случае механической деформации под действием сдвигового напряжения, приложенного к планарно ориентированной границе ЖК-канала, по сечению канала градиент температуры  $\nabla T$  формируется лишь при условии неполной термической изоляции этой границы. Величина этого  $\nabla T$  пропорциональна величине теплового потока  $q_0$ , направленного через верхнюю ограничивающую поверхность. Если же достигалась полная термическая изоляция верхней ограничивающей поверхности при условии, что на нижней температуре была постоянна, то вся механическая энергия, соответству-

ющая сдвиговому напряжению, диссипировала в форме гидродинамического потока, направленного параллельно ограничивающим поверхностям ЖК-канала, вызывая таким образом переориентацию поля директора. Было показано, что изменение направления сдвигового напряжения (например, с положительного на отрицательное) качественно меняет характер релаксации поля директора. Все это свидетельствует о том, что характер сдвигового напряжения не только сильно влияет на ориентацию поля директора ЖК-канала, но и способен при определенных условиях термической изоляции ограничивающей поверхности сформировать градиент температуры по сечению ГОЖК-канала. Таким образом, мы надеемся, что настоящая работа дает ответы на некоторые вопросы, связанные с описанием релаксационных процессов, протекающих в ЖК-материалах под действием механической деформации, а также предлагает описание механизма, ответственного за возникновение градиента температуры в ЖК-каналах.

Исследованные в работе особенности, связанные с реакцией ЖК-материала инкапсулированного в тонкие и сверхтонкие каналы на локализованное воздействие сдвигового напряжения, необходимо учитывать при создании сенсоров и датчиков используемых в биотехнологических приложениях, медицине и биометрических оптических системах.

#### Список литературы

- [1] R.B. Shoch, J.Y. Han, P. Renaud. *Rev. Mod. Phys.* **80**, 839 (2008).
- [2] W. Sparreboom, A. van den Berg, J.C.T. Eijkel. *New. J. Phys.* **12**, 0115004 (2010).
- [3] A.V. Zakharov, A.A. Vakulenko. *J. Chem. Phys.* **127**, 084907 (2007).
- [4] A.V. Zakharov, A.A. Vakulenko, M. Iwamoto. *J. Chem. Phys.* **132**, 224906 (2010).
- [5] S.J. Woltman, G.D. Jay, G.P. Crawford. *Nature Mater.* **6**, 929 (2007).
- [6] J.L. Ericksen. *Arch. Ration. Mech. Anal.* **4**, 231 (1960).
- [7] F.M. Leslie. *Arch. Ration. Mech. Anal.* **28**, 265 (1968).
- [8] С. Гроот, П. Мазур. *Неравновесная термодинамика*. Мир, М. (1964). 456 с.
- [9] R.S. Akopyan, R.B. Alaverdian, E.A. Santrosian, Y.S. Chilingarian. *J. Appl. Phys.* **90**, 3371 (2001).
- [10] И.С. Березин, Н.Р. Жидков. *Методы вычислений*. Физматгиз, М. (1964). 464 с.
- [11] A.V. Zakharov, A.A. Vakulenko. *Chem. Phys. Lett.* **454**, 80 (2008).

*Редактор Т.Н. Василевская*