01;05

Термоориентационный эффект в нематическом жидком кристалле

© С.И. Трашкеев, А.В. Бритвин

Институт лазерной физики СО РАН,
630090 Новосибирск, Россия
e-mail: sitrskv@mail.ru

(Поступило в Редакцию 19 октября 2010 г.)

Предложена и обоснована система уравнений, описывающая термоориентационный эффект в нехиральных жидких кристаллах, наблюдавшийся ранее. Эффект переориентации директора под действием градиента температуры во многом аналогичен переходу Фредерикса в электрическом или магнитном поле. Угол отклонения директора от начального положения определяется квадратом градиента температуры. Эффект наблюдается для исходно однородно ориентированного нематического жидкого кристалла и в установившемся режиме не сопровождается макроскопическими потоками среды.

Введение

Вопросу взаимодействия жидких кристаллов (ЖК) с тепловыми потоками посвящено довольно большое количество как теоретических, так и экспериментальных работ. В настоящее время одним из наиболее изученых является термомеханический эффект Лемана — поворот молекул холестерических ЖК в поле градиента температуры [1,2]. Показано, что этот эффект связан с отсутствием зеркальной симметрии холестерина и, следовательно, не может иметь аналога в случае нехиральных ЖК, и в первую очередь нематических ЖК (НЖК) [3]. В начале 1980-х гг. Р.С. Акопяном и Б.Я. Зельдовичем [4] было высказано предположение о возможности термомеханического эффекта в НЖК, имеющем исходную пространственно неоднородную ориентацию директора. Предсказанное динамическое взаимодействие, линейное по градиенту температуры, как и эффект Лемана, было достаточно убедительно подтверждено экспериментально [5,6], хотя дискуссии по этому вопросу ведутся до сих пор [7,8]. В работе [9] противоречия, отмеченные в [7], объяснялись незамкнутостью системы. Рассматриваемый в настоящей работе случай ориентационного термоупругого взаимодействия, не обсуждавшийся ранее в литературе, относится к эффектам в открытых системах и имеет квадратичный характер по градиенту температуры. Данный тип взаимодействия был зарегистрирован экспериментально и описан в работе [1], где высказано предположение об аналогии наблюдавшегося явления с переориентацией Фредерикса в стационарных электромагнитных полях. В работе [1] предложены модель явления и соответствующая система уравнений, требующая более строгого обоснования, которое представлено в данной работе.

По-видимому, впервые обсуждаемый термоориентационный эффект наблюдался авторами работы [10], где исследовалась переориентация директора НЖК в неоднородном температурном поле, возникающем в результате локального поглощения лазерного излучения средой. Физическая модель явления, предложенная в [10], связывает переориентацию директора с флексоэлектрическим эффектом. Авторы не согласны с предложенной в [10] трактовкой, несмотря на то что уравнение для ориентации директора записано в форме, схожей с приведенной в [1] и в настоящей работе. Основное возражение заключается в том, что стационарная флексоэлектрическая переориентация в НЖК практически невозможна (см., например, [11]). Причина нестационарности такой переориентации в том, что НЖК обладает заметной проводимостью, и возникшие вследствие флексоэлектрического эффекта заряды стекают за время порядка или менее 10^{-2} s [11], вследствие чего поляризация среды и связанная с ней переориентация директора должны исчезнуть. Это противоречит данным [10] о стационарности наблюдавшегося эффекта.

Вывод основных уравнений

В рамках [4,6,8,9] для описания термомеханического эффекта феноменологически предполагалась дополнительная (аддитивная) зависимость тензора напряжений с учетом присущей НЖК симметрии в виде линейной функции от градиента температуры T:

$$\Sigma_{ij}^{thm} = \beta_{ijklp} \frac{\partial T}{\partial x_k} \frac{\partial n_l}{\partial x_p}, \tag{1}$$

где термомеханический тензор β_{ijklp} может зависеть от нечетных степеней директора. При такой постановке из (1) (кроме необходимости предварительной деформации однородного состояния директора) в силу гидродинамических уравнений движения Эриксена–Лесли [11] следует, что в НЖК всегда присутствует макроскопическое перемещение жидкости, $\mathbf{v} \neq 0$. В рассматриваемом нами термоупругом взаимодействии эти положения могут не выполняться.

Как предложено в работе [12], для полной характеристики структурных недиссипативных изменений в ЖК необходимо записать общий лагранжиан (в стационарном случае — плотность свободной энергии) так, чтобы при его вариации получалась замкнутая система уравнений равновесия для всех переменных, входящих в рассматриваемую задачу.

В стационарном случае при отсутствии макроскопического течения жидкости ($\mathbf{v} = 0$) переменными, описывающими систему НЖК, находящегося в температурном поле $T = T(\mathbf{r})$, являются директор $\mathbf{n} = \mathbf{n}(\mathbf{r})$ и температура T, что следует из терии переноса тепла для несжимаемой нематической жидкости [11,13]. Стационарное состояние описывается уравнениями равновесия директора и уравнением теплопроводности в анизотропной жидкости. Чтобы их получить, на основе вариации единого функционала плотности свободной энергии запишем

$$F = F_{\mathrm{el}} + F_{\mathrm{thr}}, \qquad (2)$$

где F_{el} — упругая составляющая, определяемая соотношением [11]:

$$F_{\mathrm{el}} = \frac{1}{2}\left\{K_1(\operatorname{div}\mathbf{n})^2 + K_2(\mathbf{n}\operatorname{rot}\mathbf{n})^2 + K_3(\mathbf{n}\operatorname{rot}\mathbf{n})^2\right\}; \qquad (3)$$

$\mathbf{n}$ — директор, $(\mathbf{n}, \mathbf{n}) = 1$; K_i — упругие константы Франка; F_{thr} — термическая часть энергии, вариация которой по температуре должна давать уравнение анизотропной теплопроводности вида [11,13]

$$\operatorname{div}(\hat{\lambda}\nabla T) = \frac{\partial}{\partial x_i}\left(\lambda_{ij}\frac{\partial T}{\partial x_j}\right) = 0. \qquad (4)$$

Значения элементов тензора теплопроводности $\hat{\lambda} = [\lambda_{ij}]$ определяются соотношением

$$\lambda_{ij} = \lambda_\perp\delta_{ij} + \lambda_a n_i n_j, \quad \lambda_a = \lambda_\parallel - \lambda_\perp, \qquad (5)$$

где $\lambda_\parallel, \lambda_\perp$ — коэффициенты теплопроводности вдоль и поперек директора $\mathbf{n}$; δ_{ij} — символ Кронекера. Для того чтобы удовлетворить стационарному уравнению анизотропной теплопроводности, значение термической добавки F_{thr}, удовлетворяющей симметрии НЖК ($\mathbf{n} \equiv -\mathbf{n}$), необходимо выбрать в виде квадратичной формы от вектора ∇T

$$F_{\mathrm{thr}} = -\frac{1}{2}\left[\alpha_\perp(\nabla T)^2 + \alpha_a(\mathbf{n}\nabla T)^2\right], \qquad (6)$$

где термический тензор α_{ij} определяется аналогично (5):

$$\alpha_{ij} = \alpha_\perp\delta_{ij} + \alpha_a n_i n_j, \quad \alpha_a = \alpha_\parallel - \alpha_\perp \qquad (7)$$

и имеет размерность $[\alpha_{ij}] = \mathrm{N/K}^2$. Вариация (6) по градиенту температуры (тензор $\hat{\alpha} = [\alpha_{ij}]$ считаем не зависящим от температуры) дает уравнение

$$\frac{\delta F_{\mathrm{thr}}}{\delta T} = \operatorname{div}(\hat{\alpha}\nabla T) = \frac{\partial}{\partial x_i}\left(\alpha_{ij}\frac{\partial T}{\partial x_j}\right)$$
$$= \alpha_\perp\Delta T + \alpha_a\operatorname{div}[\mathbf{n}(\mathbf{n}\nabla T)] = 0. \qquad (8)$$

Сравнив (4) и (5) с (7) и (8), получим, что термический тензор должен быть пропорционален тензору теплопроводности:

$$\alpha_{ij} = \eta\lambda_{ij}. \qquad (9)$$

Коэффициент пропорциональности η в (9) имеет размерность s/K.

Значение α_a (или η) по порядку величины можно оценить из размерностных соображений. Введенный в работе [4] коэффициент β_{ijklp} термомеханического эффекта (см. (1)) имеет размерность $[\beta_{ijklp}] = \mathrm{N/K}$. Следовательно, можно полагать

$$|\alpha_a| \approx \frac{\beta^2}{K} \approx 10^{-11}[\mathrm{N/K}^2],$$

$$|\eta| \approx \left|\frac{\alpha_a}{\lambda_a}\right| = \frac{\beta^2}{K|\lambda_a|} \approx 10^{-10}[\mathrm{s/K}], \qquad (10)$$

где $K \approx 10^{-11}\,\mathrm{N}$ — характерное значение упругой константы Франка, $\lambda_a \approx 0.1\,\mathrm{W/(m\cdot K)}$ и, согласно [4] для среднего значения, $\beta \approx \overline{\beta_{ijklp}} \approx 10^{-11}\,\mathrm{N/K}$. Характерная величина температурного градиента, необходимого для внесения в ориентацию НЖК искажения, можно оценить, сравнив в (2) вклады упругой (3) и анизотропной термической (6) составляющих:

$$F_{\mathrm{el}} \approx \alpha_a(\mathbf{n}\nabla T)^2 \to \frac{K}{L^2} \approx \alpha_a\left(\frac{\Delta T}{L}\right)^2. \qquad (11)$$

Из (11) следует порядок величины температурного перепада:

$$\Delta T \approx \sqrt{\frac{K}{|\alpha_a|}} \approx 1K, \qquad (12)$$

что вполне достижимо в экспериментальных условиях. Аналогичная величина получается, если рассмотреть предполагаемый эффект на молекулярном уровне, как это сделано в [4] для оценки термомеханического коэффициента. Величины (10), (12) согласуются с измерениями, проведенными в [1].

Система уравнений, описывающих термодеформацию в НЖК, получается после вариации (2), (3) и (6) по переменным $\mathbf{n}$ и T, при этом коэффициенты, входящие в функционал, берутся при постоянной температуре. Значение плотности свободной энергии (2), записанное для упрощения в одноконстантном приближении, принимает вид

$$F = \frac{K}{2}\left[(\nabla\theta)^2 + \sin^2\theta(\nabla\varphi)^2\right] - \frac{\alpha_\perp}{2}(\nabla T)^2 - \frac{\alpha_a}{2}(\mathbf{n}\nabla T)^2, \qquad (13)$$

где компоненты директора $\mathbf{n}$ в упругой части выражения (3) представлены через полярный θ и азимутальный φ углы в следующей форме:

$$\mathbf{n} = (n_x, n_y, n_z) = (\sin\theta\cos\varphi, \sin\theta\sin\varphi, \cos\theta). \qquad (14)$$

Функционал (13) эквивалентен выражению для свободной энергии, описывающей взаимодействие НЖК с квазистационарным электрическим полем при переориентации Фредерикса [11] с формальной заменой:

$$\mathbf{E} = -\nabla U \to -\nabla T, \quad \frac{\varepsilon_\perp}{4\pi} \to \alpha_\perp, \quad \frac{\varepsilon_\parallel}{4\pi} \to \alpha_\parallel. \qquad (15)$$

Как следует из (13) и аналогии с эффектом Фредерикса, отличием термической переориентации в НЖК от термомеханического эффекта [4] являются необязательность предварительной деформации однородного состояния директора и возможность стационарного состояния искаженной ориентации без сопутствующего макроскопического переноса жидкости, $\mathbf{v} = 0$. Последнее утверждение верно в случае отсутствия термомеханического эффекта, $\beta_{ijklp} = 0$.

Вариация плотности свободной энергии (13) по переменным θ, φ и T дает уравнения равновесия вида

$$K\big[\Delta\theta - \sin\theta\cos\theta(\nabla\varphi)^2\big] + \alpha_a(\mathbf{m}\nabla T)(\mathbf{n}\nabla T) = 0,$$

$$K\mathrm{div}(\sin^2\theta\nabla\varphi) + \alpha_a\sin\theta(\mathbf{p}\nabla\mathbf{T})(\mathbf{n}\nabla T) = 0, \qquad (16)$$

$$\lambda_\perp\Delta T + \lambda_a\mathrm{div}\big[\mathbf{n}(\mathbf{n}\nabla T)\big] = 0,$$

где $\mathbf{m}$ и $\mathbf{p}$ — вспомогательные единичные векторы, ортогональные к $\mathbf{n}$ и определяемые соотношениями

$$\mathbf{m} = (m_x, m_y, m_z) = \frac{\partial\mathbf{n}}{\partial\theta}$$

$$= (\cos\theta\cos\varphi, \cos\theta\sin\varphi, -\sin\theta),$$

$$\mathbf{p} = (p_x, p_y, p_z) = \frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial\mathbf{n}}{\partial\varphi} = (-\sin\varphi, \cos\varphi, 0), \quad (17)$$

$$(\mathbf{nm}) = 0, \quad (\mathbf{np}) = 0, \quad (\mathbf{pm}) = 0.$$

Учет динамики термоориентационных процессов в общем виде требует рассмотрения гидродинамических ($\mathbf{v} \neq 0$) уравнений Эриксена–Лесли [11] с учетом диссипативных процессов и термомеханического ($\beta_{ijklp} \neq 0$) эффекта [4]. В рассматриваемом случае это приведет (по аналогии с переходом Фредерикса) к возникновению обратных потоков и незатухающего термомеханического перемещения нематической жидкости. В данной работе для краткости ограничимся уравнениями в приближении отсутствия гидродинамических потоков ($\mathbf{v} = 0$). Так, следуя [13], с учетом обозначений (14), (17) получаем

$$\gamma\frac{\partial\theta}{\partial t} = K\big[\Delta\theta - \sin\theta\cos\theta(\nabla\varphi)^2\big] + \alpha_a(\mathbf{m}\nabla T)(\mathbf{n}\nabla T),$$

$$\gamma\sin^2\theta\frac{\partial\varphi}{\partial t} = K\mathrm{div}(\sin^2\theta\nabla\varphi) + \alpha_a\sin\theta(\mathbf{p}\nabla T)(\mathbf{n}\nabla T), \qquad (18)$$

$$C\frac{\partial T}{\partial t} = \lambda_\perp\Delta T + \lambda_a\mathrm{div}[\mathbf{n}(\mathbf{n}\nabla T)]$$

$$+\gamma\left[\left(\frac{\partial\theta}{\partial t}\right)^2 + \sin^2\theta\left(\frac{\partial\varphi}{\partial t}\right)^2\right] + Q,$$

где γ — вращательная вязкость; $C = c_{\mathrm{sp}}\rho$; c_{sp}, ρ — удельная теплоемкость и плотность НЖК; Q — объемное тепловыделение от внешних источников, которые могут отсутствовать. При решении системы уравнений необходимо учитывать температурные зависимости входящих в (18) коэффициентов, что нельзя делать при выполнении процедуры варьирования. Последнее является следствием того факта, что функционал свободной энергии сам является разложением в ряд по степеням искомых переменных и их градиентов [13]. Слагаемое в квадратных скобках в уравнении теплопроводности описывает тепловыделение вследствие вращения директора в вязкой среде и определяется через релаксационный потенциал R [13] в виде

$$2R = \gamma\left(\frac{\partial n}{\partial t}\right)^2 = \gamma\left[\left(\frac{\partial\theta}{\partial t}\right)^2 + \sin^2\theta\left(\frac{\partial\varphi}{\partial t}\right)^2\right]. \qquad (19)$$

Диссипативная добавка (19), как отмечалось в [9], нарушает симметрию по отношению к обращению времени, поэтому энтропия такой неизолированной системы может меняться.

Для полной математической постановки задачи уравнения (18) необходимо дополнить граничными и начальными условиями, которые определяются конкретной постановкой задачи. В частности, тепловой поток на тепловыделяющей поверхности, расположенной вдоль оси x и соответствующий условиям эксперимента [1], задается в виде кусочно-гладкой периодической зависимости.

$$g\left.\frac{\partial T}{\partial z}\right|_{Sf} = W\Pi(x), \qquad (20)$$

где g — коэффициент теплоотдачи размерности $\mathrm{W/(m\cdot K)}$, определяемый геометрией нагревающей полосы [1], толщиной зазора НЖК L и ограничивающего верхнего стекла $d \gg L$, а также коэффициентами теплопроводности для обеих сред; W — теповой поток, выделяемый за счет тока, протекающего по нагревательной полосе; Π — периодическая кусочно-гладкая функция с единичной амплитудой.

Наблюдение эффекта осуществлялось в поляризованном свете, поэтому для сравнения результатов расчета с эксперименом вычислялось изменение потока, линейно поляризованного в заданной плоскости света при прохождении им образца ЖК. Направление директора оказывает влияние на набег фазы необыкновенной волны ψ, прошедшей через ЖК. В приближении геометрической оптики ψ описывается уравнением эйконала для одноосной среды

$$\frac{[\mathbf{n}\times\nabla\psi]^2}{\varepsilon_\parallel} + \frac{(\mathbf{n}\nabla\psi)^2}{\varepsilon_\perp} \equiv \frac{(\mathbf{m}\nabla\psi)^2}{\varepsilon_\parallel}$$

$$+\frac{(\mathbf{p}\nabla\psi)^2}{\varepsilon_\parallel} + \frac{(\mathbf{n}\nabla\psi)^2}{\varepsilon_\perp} = 1, \qquad (21)$$

где $\varepsilon_\parallel, \varepsilon_\perp$ — диэлектрические постоянные на световой частоте вдоль и поперек директора $\mathbf{n}$, определяющие показатели преломления $n_\parallel = \varepsilon_\parallel^{1/2}$ и $n_\perp = \varepsilon_\perp^{1/2}$ вдоль главных осей ЖК.

Анализ простых случаев термодеформаций при учете (15) можно найти во многих учебниках и монографиях, описывающих переориентацию Фредерикса (см., например, [11]). Остановимся более подробно на случае, описывающем эксперимент работы [1]. НЖК занимает объем в виде плоскопараллельного слоя толщиной L и не имеет внешних источников тепловыделения $Q = 0$. Переориентация директора задается одним углом θ ($\varphi = 0$), лежащим в выбранной плоскости x, y. Уравнения (18) для $\theta = \theta(t, x, y)$ и $T = T(t, x, y)$ с учетом различия между упругими константами Франка из (3) принимают вид

$$\gamma \frac{\partial \theta}{\partial t} = K_3 \Delta\theta + (K_1 - K_3)\big(\mathbf{m}\nabla(\mathbf{m}\nabla\theta)\big) + \alpha_a(\mathbf{n}\nabla T)(\mathbf{m}\nabla T),$$

$$C \frac{\partial T}{\partial t} = \lambda_\perp \Delta T + \lambda_a \nabla\big(\mathbf{n}(\mathbf{n}\nabla T)\big) + \gamma\left(\frac{\partial \theta}{\partial t}\right)^2, \qquad (22)$$

$$-\infty < x < \infty, \quad 0 \le y \le L,$$

где векторы и дифференциальные операторы имеют двумерную форму:

$$\mathbf{n} = (\sin\theta, \cos\theta), \quad \mathbf{m} = (\cos\theta, -\sin\theta),$$

$$\Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2}, \quad \nabla = \left(\frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y}\right). \qquad (23)$$

Уравнение эйконала (21) записывается в виде

$$\frac{(\mathbf{m}\nabla\psi)^3}{\varepsilon_\parallel} + \frac{(\mathbf{n}\nabla\psi)^2}{\varepsilon_\perp} = 1. \qquad (24)$$

В случае пренебрежения рефракцией из (24) получается известное [11,15,16] соотношение, определяющее фазу световой волны на выходе из образца $\psi_L(x)$ в зависимости от показателя преломления необыкновенной волны n_e для частоты ω:

$$\psi_L(x) = \frac{\omega}{c}\,\psi(x, L) = \frac{\omega}{c}\int_0^L n_e(x, y)\,dy,$$

$$n_e^2(x, y) = \frac{\varepsilon_\parallel \varepsilon_\perp}{\varepsilon_\perp + (\varepsilon_\parallel - \varepsilon_\perp)\cos^2\theta(x, y)}.$$

Уравнения (18), (21) и их двумерный вариант (22), (24) исследовались с использованием численных методов. Приведенные системы уравнений являются нелинейными и в общем виде (при произвольном значении входящих в уравнения параметров) могут реализовать разнообразные типы решений вплоть до формирования волновых и разрывных зависимостей. В настоящей работе не приводится полный математический анализ полученных систем уравнений.

Моделирование эксперимента

Для моделирования эксперимента, описанного в работе [1], необходимо задать граничные условия, соответствующие кусочно-гладкому с периодом Λ тепловыделению на верхней поверхности ($y = L$), заданной температуре T_0 на нижней ($y = 0$) и фиксированному значению угла $\theta = \theta_0$ на обеих поверхностях ($y = 0, L$) для жесткой граничной ориентации директора НЖК. По переменной x наиболее приемлемыми являются периодические граничные условия с выбором расчетного размера области вдоль x, кратного Λ. Если переписать (22) в безразмерной форме, то система уравнений принимает вид

$$\frac{\partial \theta}{\partial t'} = \theta_{ii} - K'_a m_i \frac{\partial}{\partial x'_i}(m_j\theta_j) + \alpha'_a n_i m_j T_i T'_j,$$

$$\frac{\partial T'}{\partial t'} = \lambda' \frac{\partial}{\partial x'_i}\left[(\delta_{ij} + \lambda'_a n_i n_j)T'_j\right] + \gamma'\left(\frac{\partial \theta}{\partial t'}\right)^2, \qquad (25)$$

$$i, j = 1, 2 = x', y', \quad -\Lambda' < x' < \Lambda', \quad 0 < y' < 1.$$

Граничные условия записывались следующим образом:

$$\theta|_{y'=0,1} = \theta_0, \quad T'|_{y'=0} = 0,$$

$$\left.\frac{\partial T'}{\partial z'}\right|_{y'=1} = \begin{cases} 1, & \big(k - \frac{1}{4}\big)\Lambda' \le x' \le \big(k + \frac{1}{4}\big)\Lambda', \\ 0, & \big(k + \frac{1}{4}\big)\Lambda' < x' < \big(k + \frac{3}{4}\big)\Lambda', \end{cases} \qquad (26)$$

$$k = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots$$

В (25), (26) все геометрические параметры измеряются в единицах L ($x = Lx'$, $y = Ly'$), время $t = (\gamma L^2/\pi^2 K_3)t'$, индексы у искомых скалярных величин $\theta(t', x', y')$ и $T(t', x', y')$ соответствуют дифференцированию по безразмерным координатам x', y'; n_i, m_i — декартовы компоненты векторов $\mathbf{n}$ и $\mathbf{m}$ из (23), по повторяющимся индексам подразумевается суммирование. Остальные параметры и температура, помеченные штрихами, представляют собой следующие комбинации размерных величин:

$$T' = \frac{T - T_0}{T_L} = \frac{g}{W}\frac{T - T_0}{L}, \quad \Lambda' = \frac{\Lambda}{L}, \quad K'_a = \frac{K_3 - K_1}{K_3},$$

$$\alpha'_a = \pi^2 \frac{\alpha_a}{K_3} T_L^2 = \eta \frac{\pi^2 \lambda_a}{K_3} T_L^2 = \pi^2 \frac{\alpha_a}{K_3}\left(\frac{WL}{g}\right)^2, \qquad (27)$$

$$\lambda' = \lambda_\perp \frac{\gamma}{\pi^2 C K_3}, \quad \lambda'_a = \frac{\alpha_a}{\alpha_\perp} = \frac{\lambda_a}{\lambda_\perp},$$

$$\gamma' = \frac{\pi^2 K_3}{C T_L L^2} = \frac{\pi^2 g K_3}{C W L^3}.$$

Параметр внешнего воздействия $T_L = WL/g$ в первом соотношении для безразмерной температуры (27) можно трактовать как эффективную температуру верхней границы НЖК.

Для расчета установившихся решений ($t \to \infty$) начальные условия не имеют принципиального значения. Для получения стационарного состояния системы начальные условия выбирались в виде периодической функции по обеим пространственным переменным с добавкой постоянной составляющей в случае ненулевых граничных условий для директора и в виде произведения квадратичного по z полинома и периодической по x функций для температуры слоя НЖК.

Уравнение эйконала (24) в безразмерных переменных записывается очевидным образом. Параметры НЖК, входящие в определение (27), были взяты из монографий [14,15] и цитируемой там литературы. В общем виде температурные зависимости параметров при численном решении интерполировались сплайнами не выше третьего порядка. Как показали расчеты с учетом точности измерений [1] и в температурных интервалах, не превышающих 5–7° от комнатной температуры для НЖК 1289 ($T_{N-1} = 62°\mathrm{C}$), в (27) можно использовать средние значения параметров. Для расчетов и анализа экспериментальных результатов [1] использовались следующие значения параметров: $L = 40\,\mu\mathrm{m}$, $\Lambda = 100\,\mu\mathrm{m}$, $K_1 = 1.35 \cdot 10^{-11}\,\mathrm{N}$, $K_3 = 1.5 \cdot 10^{11}\,\mathrm{N}$, $C = c_{\mathrm{sp}}\rho = 3 \cdot 10^6\,\mathrm{J/(m^3K)}$, $\lambda_\perp = 0.15\,\mathrm{W/(m \cdot K)}$, $\lambda_\parallel = 0.35\,\mathrm{W/(m \cdot K)}$, $\gamma = 0.1\,\mathrm{Pa \cdot s}$.

Формально к подгоночным параметрам, варьируемым для сравнения с экспериментальными и численными данными, относятся значения α'_a и γ' (27), зависящие от неизвестной величины α_a и не определяемого точно в эксперименте параметра теплоотдачи g или T_L. Оценивая численные значения для безразмерных параметров уравнения теплопроводности, получим: $\lambda' = 33$, $\gamma' = 7 \cdot 10^{-6}/T_L \ll \lambda'$. Отсюда следует, что влиянием вязкого тепловыделения на процесс термоориентации можно пренебречь, и число варьируемых параметров сократится до единственного α'_a. Численный анализ уравнений (25) показал, что качественные изменения в характере их решений (например, формирование волновых процессов) происходят при значениях $\lambda' = 1$, $\gamma' \geq 0.05$.

Проведенные численные исследования уравнений (25) с граничными условиями (26) дали хорошее качественное совпадение с экспериментальными данными [1]. Достаточно простое объяснение получила несимметричность области просветления относительно краев нагревательного элемента. Симметрия исчезает при наличии отклонения директора на границе от нормального (гомеотропного) направления $\theta_0 \neq 0$ в (26). Наилучшее совпадение с экспериментальными данными было получено при $\theta_0 = 7 \cdot 10^{-3}$ rad.

Некоторые результаты расчетов приведены на рисунках. На трехмерных графиках установившихся значений на рис. 1, 2 показаны поверхности величины угла отклонения директора и температурного поля соответственно. Область значений приведена на площади от середины первого нагревателя ($x = 0$) до середины третьего нагревателя ($x = 200\,\mu\mathrm{m}$). Нагревательные элементы расположены вдоль оси x на поверхности $y = L = 40\,\mu\mathrm{m}$. Размеры даны в микрометрах и соответствуют условиям эксперимента [1].

На рис. 1 представлены поверхности угла отклонения директора θ для трех различных значений параметра a'_a. Максимальная переориентация директора (угол отклонения) наблюдается вблизи краев нагревателей, где максимален градиент температуры (рис. 2). Знаки угла отклонения директора θ различны у краев нагревателя и соответствуют противоположным направлениям теплового потока вдоль продольной координаты x. Деформация растет с увеличением теплового потока. Температурное поле между подложками при $\alpha'_a = 300$ представлено на рис. 2. Форма поверхности при $\gamma' \ll \lambda'$ практически не зависит от величины теплового потока.

На рис. 3 приведена динамика процесса переориентации директора. Кривая *1* — среднее значение квадрата x-компоненты директора $(n_x)^2 = \sin^2\theta$ по объему (по плащади расчетной области), *2* — среднее значение

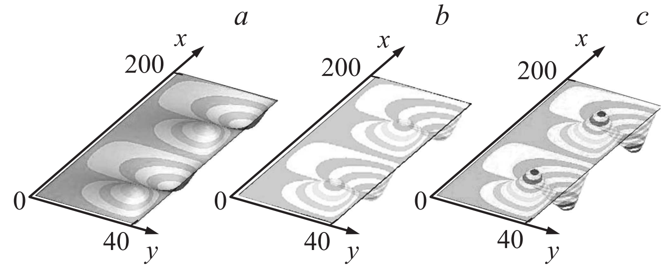

Рис. 1. Поверхности угла отклонения директора от начального значения для различных величин параметра α'_a: a — 150, b — 300, c — 600.

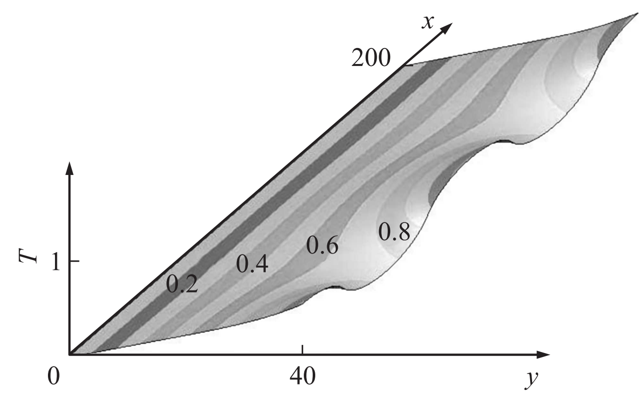

Рис. 2. Распределение температуры между подложками.

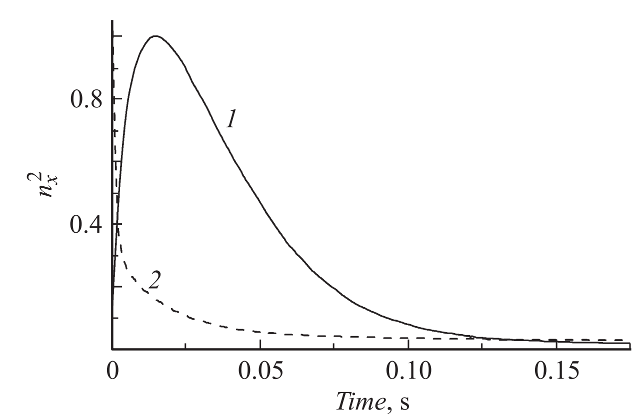

Рис. 3. Изменение средних (нормированных) значений квадрата x-компоненты директора (*1*) и квадрата градиента температуры (*2*) от безразмерного времени.

квадрата градиента температуры также по объему. Как видно из рисунка, градиент температуры монотонно убывает по времени, кривая отклонения директора в начальный момент достигает максимума, затем монотонно спадает. Полученный характер поведения решения уравнений по времени качественно хорошо согласуется с экспериментальными наблюдениями [1], в которых в момент включения питания нагревателей наблюдается резкое увеличение количества и контраста полос, которые затем плавно убывают.

Для вычисления термоориентационного коэффициента α_a была проведена подгонка (вариацией безразмерного параметра α'_a) расчетной функции пропускания образца НЖК в установившемся режиме к аналогичной величине, полученной экспериментально. Для большей достоверности данная процедура повторялась для нескольких тепловых потоков и соответствующих им функций пропускания. На рис. 4 приведены три варианта расчета, соответствующие разным значениям α'_a, и экспериментальная кривая. Наилучшее согласие с экспериментом демонстрирует зависимость, полученная при $\alpha'_a = 300$.

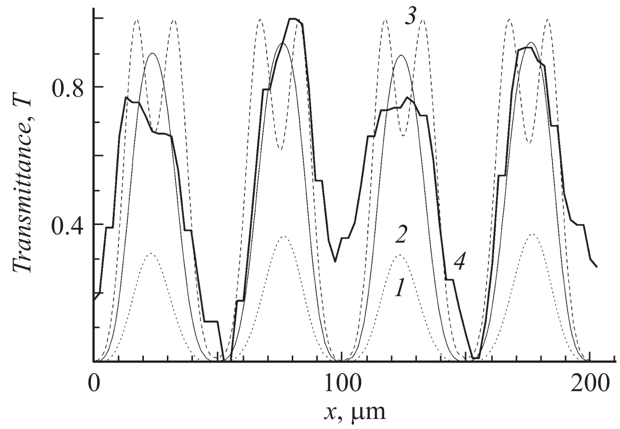

Рис. 4. Расчетные (*1–3*) и экспериментально полученная (*4*) стационарные зависимости пропускания линейно поляризованного света от поперечной координаты x.

При вычислении коэффициента α_a для найденной безразмерной величины α'_a (27) необходимо иметь значение параметра теплоотдачи g, который в условиях эксперимента [1] было достаточно сложно точно измерить. Определить g можно, усложнив задачу расчета теплового баланса и учитывая теплоотдачу через верхнюю стеклянную пластину в атмосферу. Стекло, используемое в [1], имеет теплопроводность $\lambda_{\mathrm{gl}} \approx 1\,\mathrm{W/(m \cdot K)}$ и толщину $d = 1\,\mathrm{mm}$, что намного больше толщины слоя НЖК $L = 40\,\mu\mathrm{m}$ ($d \gg L$). При таких параметрах в установившемся режиме эксперимента [1] коэффициент теплоотдачи приближенно определяется значением $g \approx 0.02\,\mathrm{W/(m \cdot K)}$. В результате подгонки находим параметр термоориентационного коэффициента $a_a = 3.2 \cdot 10^{-11}\,\mathrm{N/K^2}$. Это значение вполне согласуется с оценкой, полученной из размерностных соотношений (10).

Эксперимент, подробно изложенный в [1], и соответствующая ему численная модель, приведенная в настоящей работе, реализованы в двумерной постановке. Возможна также одномерная постановка задачи наблюдения термоориентационного эффекта, соответствующая пороговой переориентации директора из планарного состояния в гомеотропное под действием однородного в продольном направлении поля градиента температур. Эта постановка задачи аналогична наблюдаемому S-эффекту Фредерикса [16] в магнитном или электрическом полях. Для демонстрации одномерной тепловой переориентации были проведены соответствующие эксперименты и расчеты. В экспериментах использовалась подложка со сплошным ITO — покрытием, служившим однородным нагревателем в отличие от решетчатого покрытия из работы [1]. На аналогичном использованному в эксперименте [1] оборудовании в режиме заданного однородного теплового потока на одной из ограничивающих плоскостей не удалось достичь стационарного градиента температуры, обеспечивающего изменение пропускания более чем на $\sim 10\%$.

Экспериментальные точки зависимости прозрачности образца (яркость изображения) от плотности теплового потока W приведены на рис. 5. При таких параметрах невозможно было зафиксировать пороговые характеристики процесса и провести достаточно корректное количественное сравнение наблюдаемых зависимостей с численными расчетами. В качественном отношении экспериментальные и численные данные находились в хорошем согласии. В динамике процесс тепловой переориентации аналогичен двумерному случаю, показанному на рис. 3. Максимум угла отклонения директора от тангенциального направления и высокая яркость изображения, возникающие в начальный момент, по отношению к установившемся значениям могут различаться в несколько раз. Авторы посчитали подобные характеристики процесса недостаточно убедительными, чтобы

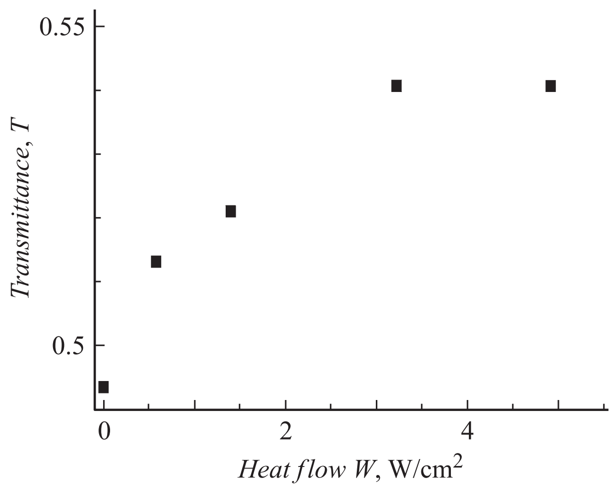

Рис. 5. Экспериментальная зависимость прозрачности образца от теплового потока W.

однозначно трактовать экспериментальные данные как доказательство термоориентационного явления.

Заключение

Результаты, изложенные в [1] и настоящей работе, по мнению авторов, достаточны для доказательства существования термоориентационных явлений в зеркально симметричных ЖК. Проведенные исследования данного эффекта позволили обосновать теоретическую модель с квадратичной зависимостью относительно градиента температуры или теплового потока отклонения директора от невозмущенного исходного состояния. Тепловая переориентация является новым физическим свойством ЖК и может дать дополнительную информацию о молекулярном строении анизотропных жидкостей. Существование квадратичного термоориентационного эффекта необходимо учитывать при расчете термодинамических характеристик жидкокристаллических сред.

Обнаруженная восприимчивость ЖК к тепловым потокам, аналогичная взаимодействию с электромагнитными полями при эффекте Фредерикса, в дальнейшем может иметь прикладное значение, например, для разработки индикаторов и устройств отображения и преобразования тепловой информации.

Авторы выражают благодарность академику С.К. Годунову за обсуждение вопроса термодинамической непротиворечивости математической модели и других материалов данной работы.

Работа частично финансируется по проекту РФФИ № 09-02-00527.

Список литературы

[1] *Деменев Е.И., Поздняков Г.А., Трашкеев С.И.* // Письма в ЖТФ. 2009. Т. 35. Вып. 14. С. 76.
[2] *Lehmann O.* // Annalen Phys. 1900. Vol. 2. N 4. P. 649.
[3] *Leslie F.M.* // Proc. Roy. Soc. A. 1968. Vol. 307. P. 359.
[4] *Акопян Р.С., Зельдович Б.Я.* // ЖЭТФ. Т. 87. 1984. Вып. 5. (11). С. 1660.
[5] *Лаврентович О.Д., Настишин Ю.А.* // Укр. физ. журн. 1987. Т. 32. № 5. С. 710.
[6] *Акопян З.С., Алавердян Р.Б., Нерсисян С.Ц.* и др. // ЖТФ. 1999. Т. 69. Вып. 4. С. 122.
[7] *Brand H.R., Pleiner H.* // Phys. Rev. A. 1987. Vol. 35. N 7. P. 3123.
[8] *Akopyan R.S., Alaverdian R.B., Santrosian E.A.* et al. // J. Appl. Phys. 2001. Vol. 90. N 7. P. 3371.
[9] *Акопян Р.С., Зельдович Б.Я., Сеферян Г.Е.* // ЖЭТФ. 2004. Т. 126. Вып. 5(11). С. 1192.
[10] *Gongjian H., Palffy-Muhoray P.* // Mol. Cryst. Liq. Cryst. 1997. Vol. 304. P. 447.
[11] *Пикин С.А.* Структурные превращения в жидких кристаллах. М.: Наука. 1981. 336 с.
[12] *Акопян Р.С., Зельдович Б.Я.* // ЖЭТФ. 1982. Т. 83. Вып. 6 (12). С. 2137.
[13] *Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М.* Теория упругости. М.: Наука, 1987. 248 с.
[14] *Томилин М.Г., Пестов С.М.* Свойства жидкокристаллических материалов. СПб.: Политехника, 2005. 296 с.
[15] *Сонин А.С.* Введение в физику жидких кристаллов. М.: Наука, 1983. 320 с.
[16] *Блинов Л.М.* Электро- и магнитооптика жидких кристаллов. М.: Наука, 1978. 384 с.