

# Ориентационная нематодинамика гибридно-ориентированного капилляра

© А.В. Захаров, А.А. Вакуленко

Институт проблем машиноведения РАН,  
Санкт-Петербург, Россия

E-mail: avak2vale@mail.ru

(Поступила в Редакцию 8 апреля 2009 г.  
В окончательной редакции 21 сентября 2009 г.)

Релаксация поля директора  $\hat{n}$  и поля скорости  $\mathbf{v}$ , а также сдвиговой компоненты тензора напряжений  $\sigma_{rz}$  и температуры  $T$  была исследована теоретически в рамках классической гидродинамики жидких кристаллов (ЖК) Эриксона–Лесли посредством численного решения системы нелинейных гидродинамических уравнений, описывающих переориентацию  $\hat{n}$  с учетом поля скорости, инициируемого градиентом температуры  $\nabla T$ , возникающим в гибридно-ориентированном ЖК (ГОЖК) капилляре. Процесс переориентации поля директора и релаксации поля температуры в капилляре был исследован для ряда гидродинамических режимов, возникающих в нематическом ГОЖК, образованном молекулами 4- $n'$ -пентил-4'-цианофенила, под действием  $\nabla T$ .

Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант № 09-02-00010-а).

## 1. Введение

Несмотря на то что исследования реологических свойств таких неньютоновских жидкостей, как жидкие кристаллы (ЖК) в капиллярах, насчитывают более чем тридцатилетнюю историю [1], прогресс в исследованиях был достигнут относительно недавно и касается в первую очередь изучения воздействия внешнего электрического поля на гидродинамические свойства ЖК-фазы в тонких капиллярах [2,3] и каналах прямоугольной формы [4]. Сильным стимулом, способствующим интенсивным исследованиям структурных и динамических свойств ЖК-фазы в тонких капиллярах цилиндрической формы, стало использование углеродных нанотрубок (УНТ), заполненных молекулярной жидкостью, такой как термотропный или лиотропный ЖК, в качестве основного элемента различного рода наносенсоров в микроэлектронике [5,6] и биотехнологиях [7]. Также многообещающие перспективы открываются перед применением УНТ в производстве ЖК-дисплеев [5,6], используемых не только в ноутбуках, мобильных телефонах, но и в ультрабыстрых оптических переключателях. Все это свидетельствует об актуальности таких исследований. Следует отметить, что в процессе эксплуатации наносенсоров часто возникают перепады температур, приводящие к формированию градиентов температуры  $\nabla T$  по сечению капилляра, что позволяет считать важным изучение влияния  $\nabla T$  на процессы как переориентации поля директора, так и релаксации поля температуры внутри капилляра.

Наличие градиента температуры  $\nabla T$  в ЖК-фазе приводит к тому, что необходимо учитывать взаимодействие  $\nabla T$  как с полем директора  $\hat{n}(\mathbf{r})$ , так и с полем скорости  $\mathbf{v}(\mathbf{r})$ , инициируемым градиентом температуры. Здесь  $\mathbf{r}$  — радиус-вектор, направленный из центра

капилляра. Но все предыдущие исследования влияния  $\nabla T$  на релаксационные и гидродинамические свойства ЖК-фазы были выполнены для случая прямоугольных ЖК-ячеек [8–11], в то время как учет цилиндрической симметрии в случае капилляра приводит к тому, что необходимо учитывать расходящиеся вклады в баланс как угловых, так и линейных моментов, действующих на единицу объема ЖК-фазы при  $r \rightarrow 0$ . Для того чтобы избежать учета этих расходимостей, была рассмотрена цилиндрическая полость, занимаемая ЖК-фазой, между внешним и внутренним соосными цилиндрами радиусов  $R_2$  и  $R_1$  и длины  $L \gg R_1, R_2$  (рис. 1). Поскольку толщина капилляра достигает нескольких десятков нанометров, будем считать, что плотность ЖК-фазы по сечению капилляра постоянна и мы имеем дело с несжимаемым нематическим ЖК (НЖК). Условие несжимаемости НЖК-фазы совместно с условием отсутствия проскальзывания на границах гибридно-ориентированного капилляра приводит к тому, что в ЖК-системе под действием градиента температуры, направленного перпендикулярно ограничивающим цилиндрам, формируется стационарное течение, направленное

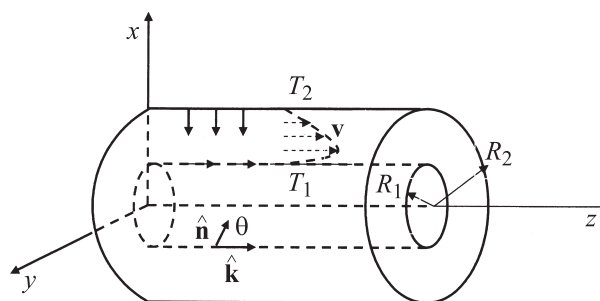


Рис. 1. Геометрия ГОЖК-капилляра.

параллельно оси цилиндров. На направление и величину этого стационарного гидродинамического потока влияют в первую очередь направление градиента температуры и характер сцепления ЖК-молекул с ограничивающими поверхностями. Таким образом, общий учет всех сил, действующих на единицу объема ЖК-фазы, позволяет не только воссоздать полную картину релаксации динамических характеристик наносенсоров, в основу которых положены капилляры наноскопических размеров, заполненные ЖК-фазой, но и точнее оценить параметры и сроки активной эксплуатации этих сенсоров.

В настоящей работе в рамках классической гидродинамики несжимаемых НЖК Эриксона–Лесли [12,13] исследована релаксация как поля директора и поля температуры, так и поля скорости и компонент тензора напряжений к равновесному распределению по сечению полости, занимаемой ЖК-фазой, между двумя соосными цилиндрами в зависимости от величины и направления градиента температуры и характера сцепления ЖК-молекул с ограничивающими поверхностями.

## 2. Основные гидродинамические уравнения и их решение

Рассмотрим термотропный ЖК в полости между двумя горизонтальными коаксиально расположенными цилиндрическими трубками радиусов  $R_1$  и  $R_2$  ( $R_1 < R_2$ ) (рис. 1). Будем считать, что эти трубки подвергнуты разогреву с разными температурами таким образом, что температура внешней трубки  $T_{r=R_2} = T_2$  выше, чем температура внутренней трубки  $T_{r=R_1} = T_1$ . Будем также предполагать, что внутренняя поверхность внешнего капилляра ( $r = R_2$ ) обработана таким образом, что на ней достигается гомеотропная (планарная) ориентация директора  $\hat{\mathbf{n}} \perp \hat{\mathbf{k}}$  ( $\hat{\mathbf{n}} \parallel \hat{\mathbf{k}}$ ), в то время как на внешней стороне внутреннего капилляра ( $r = R_1$ ) — планарная (гомеотропная) ориентация директора  $\hat{\mathbf{n}} \parallel \hat{\mathbf{k}}$  ( $\hat{\mathbf{n}} \perp \hat{\mathbf{k}}$ ), и тем самым реализуется ситуация гибридно-ориентированного ЖК (ГОЖК) капилляра. Цилиндрическая система координат, соответствующая нашей задаче, выбрана таким образом, что ось  $\hat{\mathbf{k}}$  совпадает с осью цилиндров, ось  $\hat{\mathbf{e}}_r$  направлена перпендикулярно оси  $z$  (рис. 1), а  $\hat{\mathbf{e}}_\varphi = \hat{\mathbf{k}} \times \hat{\mathbf{e}}_r$  — тангенциальный орт. Это позволяет задать ориентацию поля директора в виде  $\hat{\mathbf{n}} = \sin \theta(r) \hat{\mathbf{e}}_r + \cos \theta(r) \hat{\mathbf{k}}$ , где  $\theta$  — угол между направлением поля директора  $\hat{\mathbf{n}}$  и ортом  $\hat{\mathbf{k}}$  (рис. 1). Далее будем предполагать, что  $\hat{\mathbf{n}}$  в процессе переориентации под действием градиента температуры  $\nabla T$  всегда остается в плоскости векторов  $\hat{\mathbf{e}}_r, \hat{\mathbf{k}}$ , образованной направлением директора на внутренней поверхности капилляра, совпадающим с направлением вектора  $\hat{\mathbf{e}}_r$  (или  $\hat{\mathbf{k}}$ ), и направлением директора на внешней поверхности капилляра, совпадающим с направлением вектора  $\hat{\mathbf{k}}$  (или  $\hat{\mathbf{e}}_r$ ). Это позволяет нам считать все физические величины зависящими только от радиуса  $r$  и времени  $t$ . С учетом всего

изложенного выше выражение для директора принимает вид  $\hat{\mathbf{n}} = \sin \theta(t, r) \hat{\mathbf{e}}_r + \cos \theta(t, r) \hat{\mathbf{k}}$ , а выражение для градиента температуры имеет вид  $\nabla T(t, r) = \frac{\partial T(t, r)}{\partial r} \hat{\mathbf{e}}_r$  и таким образом все время остается в плоскости, образованной векторами  $\hat{\mathbf{e}}_r$  и  $\hat{\mathbf{k}}$ , и зависит от перепада температур  $\Delta T = T_2 - T_1$ . Здесь значения температур  $T_2$  и  $T_1$  находятся в области существования нематической фазы. Уравнение непрерывности в нашем случае может быть записано в виде

$$\begin{aligned} \nabla \cdot \mathbf{v} &= \frac{1}{r} \frac{\partial (rv_r(t, r))}{\partial r} + \frac{\partial v_z(t, r)}{\partial z} \\ &= \frac{1}{r} \frac{\partial (rv_r(t, r))}{\partial r} = 0, \end{aligned} \quad (1)$$

что с учетом отсутствия проскальзывания как минимум на одной из ограничивающих поверхностей, например  $\mathbf{v}_{r=R_2} = 0$ , приводит к тому, что поле скорости, иницируемое  $\nabla T(t, r)$ , имеет только одну компоненту  $\mathbf{v} = v_z(t, r) \hat{\mathbf{k}} \equiv u(t, r) \hat{\mathbf{k}}$ , направленную параллельно оси цилиндров. С учетом всего отмеченного выше уравнение баланса линейных моментов, действующих на единицу объема ЖК-фазы, может быть записано в виде [14]

$$\rho_m \frac{\partial u(t, r)}{\partial t} = \nabla_r \sigma_{rz}, \quad (2)$$

где  $\nabla_r \sigma_{rz} = \frac{\partial \sigma_{rz}}{\partial r} + \frac{\sigma_{rz}}{r}$ ,  $\sigma_{rz} = \frac{\partial \mathcal{R}}{\partial u_z}$  — сдвиговая компонента тензора напряжений (ТН)  $\sigma_{ij}$  ( $ij = r, z$ )

$$\mathcal{R}(t, r) = \mathcal{R}_{\text{vis}}(t, r) + \mathcal{R}_{\text{tm}}(t, r) + \mathcal{R}_{\text{th}}(t, r)$$

есть диссипационная функция Рэлея для случая цилиндрической геометрии,  $\rho_m$  — плотность ЖК-фазы. В нашем случае вклад вязких сил в диссипационную функцию

$$\mathcal{R}_{\text{vis}} = \frac{1}{2} [\gamma_1 \theta_t^2 + u_r \theta_t \mathcal{A} + h(\theta) u_r^2]$$

вклад термомеханических сил

$$\begin{aligned} \mathcal{R}_{\text{tm}} &= \xi T_r \left[ \theta_r \theta_r \left( \frac{1}{2} + \cos^2 \theta \right) + \frac{1}{4r} \theta_r \sin 2\theta \right. \\ &\quad \left. + u_r \left[ \theta_r \cos^2 \theta \left( 1 + \frac{1}{2} \sin^2 \theta \right) + \frac{3}{4r} \sin 2\theta \right] \right], \end{aligned}$$

вклад термических сил

$$\mathcal{R}_{\text{th}} = \frac{1}{2T} [T_r^2 (\lambda_{\parallel} \sin^2 \theta + \lambda_{\perp} \cos^2 \theta)].$$

Здесь  $\mathcal{A} = -\frac{1}{2} [\gamma_1(T) + \gamma_2(T) u_r(t, r) \cos 2\theta]$  и  $h = \frac{1}{4} (\gamma_1 + \alpha_5(T) + \alpha_6(T)) + \frac{1}{2} \alpha_4(T) + \frac{1}{2} \gamma_2(T) \cos 2\theta + \frac{1}{4} \alpha_1(T) \sin^2 2\theta$  — гидродинамические функции,  $u_r = \partial u(t, r) / \partial r$ ,  $T_r = \partial T(t, r) / \partial r$ ,  $\theta_t = \partial \theta(t, r) / \partial t$ ,  $\gamma_1(T)$  и  $\gamma_2(T)$  — коэффициенты вращательной вязкости (КВВ),  $\alpha_i$  ( $i = 1, \dots, 6$ ) — коэффициенты вязкости Лесли,

зависящие от температуры,  $\lambda_{\parallel}$  и  $\lambda_{\perp}$  — коэффициенты теплопроводности вдоль и поперек направления директора, а  $\xi$  — термомеханическая постоянная [14].

Уравнение баланса моментов, действующих на единицу объема ЖК-фазы, принимает вид

$$\gamma_1(T)\theta_t = \mathcal{A}(\theta)u_z + (\mathcal{G}(\theta)\theta_r)_r - \frac{1}{2}\mathcal{G}_\theta(\theta)\theta_r^2 + \frac{\theta_r}{r}\mathcal{G}(\theta) + \frac{1}{2}\left(\frac{K_1}{r}\right)_r - \xi T_r \left[ \theta_r \left( \frac{1}{2} + \cos^2 \theta \right) + \frac{3}{4r} \sin 2\theta \right]. \quad (3)$$

Здесь первые три вклада обусловлены действием вязких сил, следующие три вклада — действием упругих сил, последний вклад — действием термомеханических сил. Функция  $\mathcal{G}(\theta) = K_1(T) \sin^2 \theta + K_3(T) \cos^2 \theta$ , а коэффициенты  $K_1(T)$  и  $K_3(T)$  — упругие постоянные Франка, соответствующие поперечному и продольному изгибам и зависящие от температуры. Наконец, уравнение теплопроводности для такой анизотропной системы, как ЖК, в цилиндрической системе координат имеет вид

$$\rho_m C_P T_t = \frac{1}{r} [r T_r (\lambda_{\parallel} \sin^2 \theta + \lambda_{\perp} \cos^2 \theta)]_r + \frac{\xi}{r} \left[ r T \left( \theta_t \left( \theta_r \left( \frac{1}{2} + \cos^2 \theta \right) + \frac{1}{4r} \sin 2\theta \right) + u_r \mathcal{H}(\theta) \right) \right]_r, \quad (4)$$

где  $C_P$  — теплопроводность ЖК-системы,  $T_t = \frac{\partial T}{\partial t}$ , а  $\mathcal{H}(\theta) = \theta_r (\cos^2 \theta + \frac{1}{8} \sin^2 2\theta) + \frac{3}{4r} \sin 2\theta$ .

Для решения системы нелинейных дифференциальных уравнений в частных производных (2)–(4) нам необходимы граничные и начальные условия как для угла  $\theta$  и температуры  $T$ , так и для скорости  $u$ . Для их получения рассмотрим случай жесткого сцепления ЖК-молекул с обеими ограничивающими поверхностями. Предположим, что на внутренней поверхности внешнего цилиндра реализуется планарная (гомеотропная), а на внешней поверхности внутреннего цилиндра гомеотропная (планарная) ориентация директора. Это позволяет нам записать граничные условия для угла  $\theta$  в виде

$$\theta_{r=R_1} = 0, \quad \theta_{r=R_2} = -\frac{\pi}{2}, \quad (5a)$$

$$\theta_{r=R_1} = \frac{\pi}{2}, \quad \theta_{r=R_2} = 0. \quad (5b)$$

Начальное условие выберем в виде  $\theta(0, r) = 0$  ( $R_1 < r < R_2$ ) и позволим системе релаксировать к равновесному распределению  $\theta_{\text{eq}}(r)$  по сечению полости между двумя цилиндрами  $R_1 \leq r \leq R_2$ . Граничное условие для скорости  $u$  в случае отсутствия скольжения на ограничивающих поверхностях принимает вид

$$u(r)_{r=R_1} = u(r)_{r=R_2} = 0, \quad (6)$$

в то время как граничное условие для температуры может быть записано как

$$T(r)_{r=R_1} = T_1, \quad T(r)_{r=R_2} = T_2. \quad (7)$$

Для того чтобы провести анализ полученной системы уравнений (2)–(4), перепишем ее в безразмерном

виде. Для этого введем безразмерное время  $\tau = \left( \frac{K_{10}}{\gamma_{10}(R_2 - R_1)^2} \right) t$ , расстояние  $\bar{r} = \frac{r}{R_2 - R_1}$ , скорость  $\bar{u} = \frac{\gamma_{10}(R_2 - R_1)}{K_{10}} u$  и температуру  $\chi = \frac{T(t, r)}{T_{NI}}$ , где  $\gamma_{10}$  и  $K_{10}$  — максимальные значения КВВ и упругости в пределах температурного интервала  $[T_2, T_1]$ , а  $T_{NI}$  — температура фазового перехода нематик–изотропная жидкость. В дальнейшем верхнюю черту над пространственной переменной  $r$  и скоростью  $u$  опустим и перепишем уравнения (2)–(4) в безразмерном виде

$$\frac{\gamma_1(T)}{\gamma_{10}} \theta_\tau = \bar{\mathcal{A}}(\theta)u_r + (\bar{\mathcal{G}}(\theta)\theta_r)_r - \frac{1}{2}\bar{\mathcal{G}}_\theta(\theta)\theta_r^2 + \frac{\theta_r}{r}\bar{\mathcal{G}}(\theta) + \frac{1}{2K_{10}}\left(\frac{K_1}{r}\right)_r - \delta_1 \chi_r \left[ \theta_r \left( \frac{1}{2} + \cos^2 \theta \right) + \frac{3}{4r} \sin 2\theta \right], \quad (8)$$

$$\delta_2 \frac{\partial u}{\partial \tau} = \nabla_r \bar{\sigma}_{rz}, \quad (9)$$

$$\delta_3 \chi_\tau = \frac{1}{r} [r \chi_r (\lambda \sin^2 \theta + \cos^2 \theta)]_r + \delta_4 \frac{1}{r} \left[ r \chi \left( \theta_r \theta_r \left( \frac{1}{2} + \cos^2 \theta \right) + \frac{\theta_r}{4r} \sin 2\theta + u_r \bar{\mathcal{H}}(\theta) \right) \right]_r, \quad (10)$$

где  $\bar{\mathcal{G}} = \frac{1}{K_{10}} \mathcal{G}$ ,  $\bar{\sigma}_{rz} = \frac{(R_2 - R_1)^2}{K_{10}} \sigma_{rz}$ ,  $\lambda = \frac{\lambda_{\parallel}}{\lambda_{\perp}}$ ,  $\bar{\mathcal{H}} = \frac{1}{R_2 - R_1} \mathcal{H}$ , а  $\delta_1 = \xi \frac{T_{NI}}{K_{10}}$ ,  $\delta_2 = \frac{\rho_m K_{10}}{\gamma_{10}^2}$ ,  $\delta_3 = \frac{\rho_m C_P K_{10}}{\lambda_{\perp} \gamma_{10}}$ ,  $\delta_4 = \frac{\xi K_{10}}{\lambda_{\perp} \gamma_{10} (R_2 - R_1)^2}$  — безразмерные параметры системы.

Таким образом, граничные условия для системы уравнений (8)–(10) могут быть переписаны в виде

$$\theta_{r=a} = 0, \quad \theta_{r=a+1} = -\frac{\pi}{2}, \quad (11a)$$

$$\theta_{r=a} = \frac{\pi}{2}, \quad \theta_{r=a+1} = 0, \quad (11b)$$

$$u(r)_{r=a} = u(r)_{r=a+1} = 0, \quad (12)$$

$$\chi(r)_{r=a} = \chi_1, \quad \chi(r)_{r=a+1} = \chi_2, \quad (13)$$

где  $a = \frac{R_1}{R_2 - R_1}$ ,  $\chi_1 = \frac{T_1}{T_{NI}}$ , а  $\chi_2 = \frac{T_2}{T_{NI}}$ .

Теперь мы располагаем всем необходимым, для того чтобы исследовать релаксационные процессы, протекающие в ГОЖК-капилляре под действием градиента температуры  $\nabla T$ , направленного перпендикулярно ограничивающим поверхностям.

Сначала проведем качественный анализ уравнений (8)–(10) и для этого рассчитаем значения всех безразмерных параметров  $\delta_i$  ( $i = 1, \dots, 4$ ). Для нематика 4-*n*-пентил-4'-цианобифенил (5ЦБ) в области температур существования нематической фазы  $0.97 < \chi < 0.9862$  ( $296 < T < 307.5$  К) плотность ЖК  $10^3 \text{ kg/m}^3$ , а значения экспериментальных данных для упругой постоянной  $K_{10}$  и вязкости  $\gamma_{10}$  составляют  $\sim 9.5 \text{ pN}$  [15] и  $\sim 0.072 \text{ Pa} \cdot \text{s}$  [16] соответственно. В дальнейшем используются зависимости шести коэффициентов Лесли  $\alpha_i$  ( $i = 1, \dots, 6$ ) (в  $\text{P} \cdot \text{s}$ ) и двух упругих коэффициентов Франка  $K_1(T)$  и  $K_3(T)$

(в pN) от температуры, приведенные в работах [16] и [15] соответственно. Значение теплоемкости [17]  $C_p = 10^3 \text{ J/kg} \cdot \text{K}$  и коэффициентов теплопроводности [18]  $\lambda_{\parallel} = 0.24 \text{ W/m} \cdot \text{K}$  и  $\lambda_{\perp} = 0.13 \text{ W/m} \cdot \text{K}$  было получено калориметрическими методами, а значение термомеханического коэффициента [19]  $\xi \sim 10^{-12} \text{ J/m} \cdot \text{K}$  — экспериментально с помощью измерения максимальной скорости течения в гибридно-ориентированной ЖК-ячейке. При размере зазора  $R_2 - R_1$  между двумя цилиндрами, равном  $10 \mu\text{m}$ , и внутреннем радиусе  $R_1 = 10 \mu\text{m}$  все параметры  $\delta_i$  ( $i = 1, \dots, 4$ ) могут быть оценены как  $\delta_1 \sim 32$ ,  $\delta_2 \sim 10^{-6}$ ,  $\delta_3 \sim 10^{-3}$ ,  $\delta_4 \sim 10^{-13}$ . С учетом малости параметров  $\delta_2$ ,  $\delta_3$  и  $\delta_4$  уравнения (9) и (10) могут быть переписаны в виде

$$\bar{\sigma}_{rz} = \frac{C(\tau)}{r}, \quad (14)$$

$$[r\chi_r(\lambda \sin^2 \theta + \cos^2 \theta)]_r = 0, \quad (15)$$

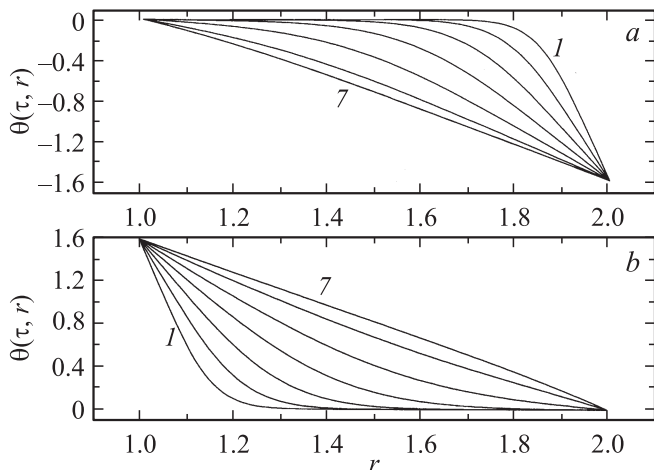
где  $C(\tau)$  — функция, зависящая от времени, находится из условия (12). Решение уравнения (15) может быть записано в виде

$$\chi(\tau, r) = \frac{\Delta\chi}{I} \int_a^{a+r} \frac{dr}{r(\lambda \cos^2 \theta + \sin^2 \theta)} + \chi_1, \quad (16)$$

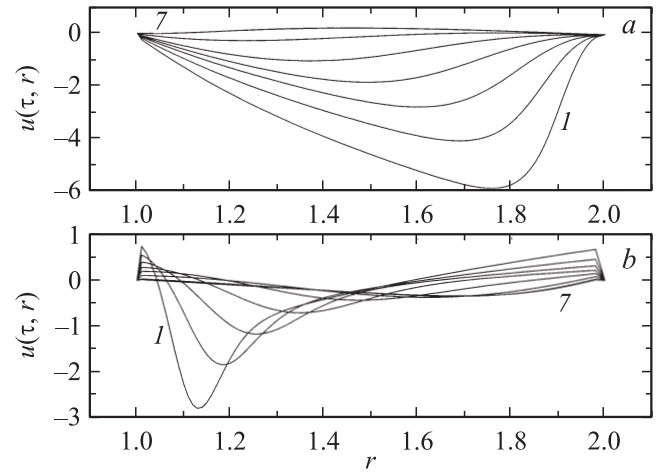
где  $\Delta\chi = \chi_2 - \chi_1$ , а  $I = \int_a^{a+1} \frac{dr}{r(\lambda \cos^2 \theta + \sin^2 \theta)}$ .

### 3. Ориентационная релаксация физических величин в ГОЖК-капилляре

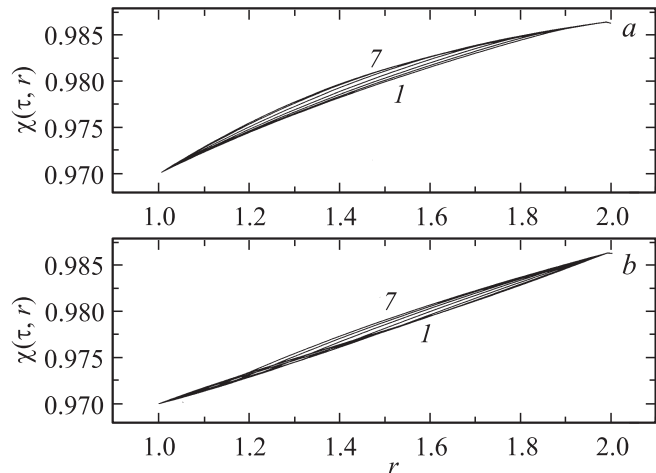
Эволюция поля директора  $\hat{n}$  к его равновесному положению  $\hat{n}_{\text{eq}}$  в ГОЖК-капилляре, которая описывается изменением угла  $\theta(\tau, r)$  от начального положения



**Рис. 2.** Релаксация угла  $\theta(\tau, r)$  к равновесному распределению  $\theta_{\text{eq}}(r)$  по сечению ГОЖК-капилляра при разных граничных условиях. *a* — граничные условия (11а), *b* — (11б).

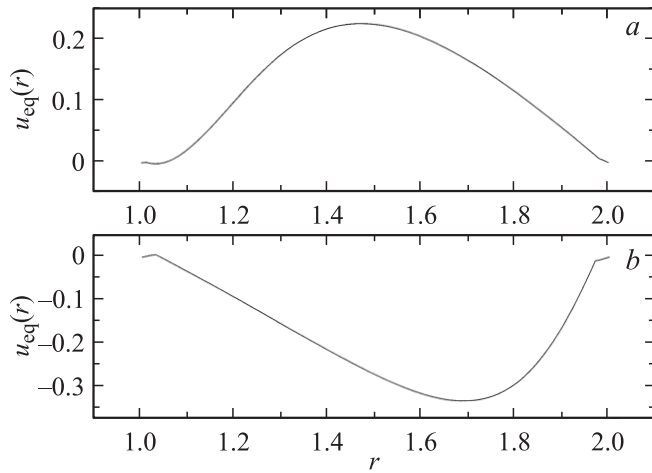


**Рис. 3.** Релаксация поля скорости  $u(\tau, r)$  к равновесному распределению  $u_{\text{eq}}(r)$  по сечению ГОЖК-капилляра. Обозначения те же, что на рис. 2.

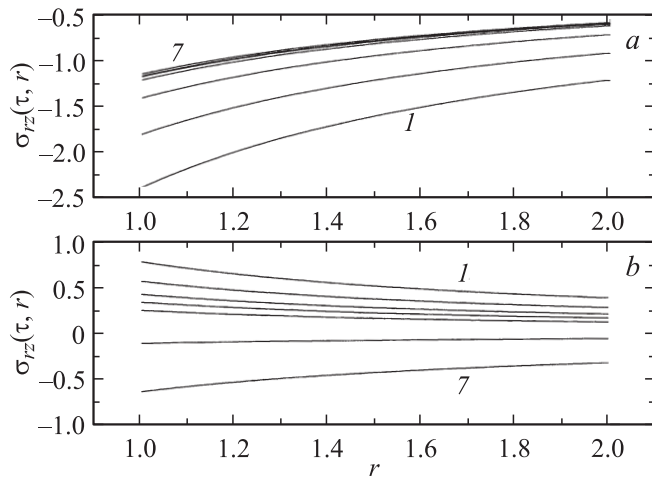


**Рис. 4.** Релаксация поля температуры  $\chi(\tau, r)$  к равновесному распределению  $\chi_{\text{eq}}(r)$  по сечению ГОЖК-капилляра. Обозначения те же, что на рис. 2.

ния  $\theta(\tau = 0, r) = 0$  к  $\theta_{\text{eq}}(r)$ , скорости  $u(\tau, r)$  и температуры  $\chi(\tau, r)$ , для случая сильного сцепления молекул ЖК с ограничивающими поверхностями и направления градиента температуры от внутренней поверхности ( $\chi_{r=a} = 0.97$  ( $\sim 297 \text{ K}$ )) к внешней поверхности ( $\chi_{r=a+1} = 0.9862$  ( $\sim 303 \text{ K}$ )) была исследована численно методом релаксации [20] и представлена на рис. 2–4 соответственно. Кривые на рис. 2, *a*, 3, *a* и 4, *a* соответствуют релаксации величин  $\theta(\tau, r)$ ,  $u(\tau, r)$  и  $\chi(\tau, r)$  по сечению полости цилиндра  $a \leq r \leq a+1$  с момента времени  $\tau(1) = 0.005$  ( $\sim 0.035 \text{ s}$ ) (кривые *I*) до  $\tau_R \sim \tau(7) = 0.32$  ( $\sim 2.2 \text{ s}$ ) (кривые 7) для случая граничного условия (11а), в то время как кривые на рис. 2, *b*, 3, *b* и 4, *b* соответствуют релаксации этих же физических величин для случая гибридной ориентации с граничным условием (11б) в те же моменты времени, что и для случая (11а). Таким образом, в нашей задаче



**Рис. 5.** Распределение равновесного поля скорости  $u_{\text{eq}}(r)$  по сечению ГОЖК-капилляра.



**Рис. 6.** Эволюция компоненты ТН  $\bar{\sigma}_{rz}(\tau, r)$  к равновесному распределению  $\bar{\sigma}_{rz}^{\text{eq}}(r)$  по сечению ГОЖК-капилляра. Обозначения те же, что на рис. 2.

перепад температуры в безразмерном виде  $\Delta\chi = 0.0162$  соответствует скачку температуры в 5 К, а промежуточные значения представлены в логарифмической шкале  $\tau(i) = 0.005 \cdot 2^{i-1}$ , где  $i = 1, \dots, 7$ . В обоих случаях жесткой ориентации поля директора на ограничивающих поверхностях вектор  $\hat{\mathbf{n}}(\tau, r)$  релаксирует к  $\hat{\mathbf{n}}_{\text{eq}}(r)$ , что характеризуется почти линейным распределением  $\theta_{\text{eq}}(r)$  по сечению полости (рис. 2, *a, b*), в то время как на качественный характер релаксации поля скорости  $u(\tau, r)$  сильное влияние оказывает способ гибридной ориентации ЖК-молекул в капилляре (рис. 3, *a, b*). Так, в случае гомеотропной ориентации директора на более теплой наружной поверхности цилиндрической полости ( $\chi_{r=a+1} = \chi_2$ ) и планарной ориентации на более холодной внутренней поверхности ( $\chi_{r=a} = \chi_1$ ) распределение скорости  $u(\tau, r)$  в начале релаксации (в момент времени  $\tau(1) = 0.005$ , т.е.  $\sim 0.035$  с) характеризуется

отрицательным направлением потока с минимальным значением вблизи наружной поверхности, при  $r \sim 1.75$ . Абсолютное значение скорости в этой точке максимально и равно  $u_{\text{max}} = |u(\tau \sim 0.005, r \sim 1.75)| \sim 5.5$ , что соответствует  $\sim 55 \mu\text{m/s}$ . В процессе релаксации устанавливается равновесное распределение  $u_{\text{eq}}(r)$  (рис. 5, *a*) в положительном направлении, характеризующееся максимумом вблизи середины капилляра, при  $r \sim 1.5$   $u_{\text{eq}}^{\text{max}} = 0.225$ , что соответствует  $\sim 2.3 \mu\text{m/s}$ . В случае гомеотропной ориентации директора на более холодной внутренней поверхности ( $\chi_{r=a} = \chi_1$ ) и планарной ориентации на более теплой внешней поверхности ( $\chi_{r=a+1} = \chi_2$ ) цилиндров распределение поля скорости в начале релаксации (в момент времени  $\tau(1) = 0.005$  ( $\sim 0.005$ ,  $r \sim 0.035$  с)) характеризуется максимумом  $u_{\text{max}} = |u(\tau \sim 0.005, r \sim 1.13)| \sim 2.75$  ( $\sim 28 \mu\text{m/s}$ ) вблизи внутренней холодной поверхности (рис. 3, *b*). При этом в целом поток направлен в отрицательную сторону, а его максимальное значение постепенно убывает вплоть до равновесного распределения  $u_{\text{eq}}(r)$  (рис. 5, *b*), характеризующегося максимумом скорости  $|u_{\text{eq}}^{\text{max}}(r \sim 1.75)| \sim 0.35$  ( $\sim 3.5 \mu\text{m/s}$ ) вблизи теплового внешнего цилиндра. Время релаксации как поля директора, так и поля скорости равно  $\sim (0.32)$  ( $\sim 2.2$  с). Здесь  $a = 1$ . Расчет распределения температуры в ГОЖК-капилляре показал, что  $\chi(\tau, r)$  эволюционирует к своему равновесному распределению по сечению цилиндрической полости значительно быстрее, чем поле скорости и директора; результат представлен на рис. 4, *a* и *b*. Отметим, что во всех описанных выше случаях полость ЖК между двумя цилиндрическими поверхностями прогрелась сверху, а критерием сходимости итерационной процедуры был выбран  $\epsilon = |(\theta_{m+1}(\tau, r) - \theta_m(\tau, r)) / \theta_m(\tau, r)| \sim 10^{-4}$ . Здесь  $m$  — номер итерации. Равновесное распределение поля температуры  $\chi_{\text{eq}}(r)$  между двумя ограничивающими цилиндрами  $a \leq r \leq a + 1$  в конечном счете близко к линейному (рис. 4, *a* и *b*). Теперь исследуем релаксацию сдвиговой компоненты ТН  $\bar{\sigma}_{rz}$  (см. (14)) в ГОЖК-капилляре для обоих случаев граничных условий (11а) и (11б). Результаты расчета эволюции  $\bar{\sigma}_{rz}(\tau, r)$  по сечению ЖК-полости  $a \leq r \leq a + 1$  от холодной планарно (гомеотропно) ориентированной внутренней ограничивающей поверхности цилиндра к более теплой гомеотропной (планарно) ориентированной внешней ограничивающей поверхности представлены на рис. 6, *a* и *b* соответственно. В первом случае гибридной ориентации поля директора (см. (11а))  $|\bar{\sigma}_{rz}(\tau, r)|$  монотонно убывает как по времени, так и по сечению ЖК-полости между ограничивающими поверхностями и достигает равновесного распределения сдвиговой компоненты ТН, характеризующейся небольшим перепадом величины с  $|\bar{\sigma}_{rz}^{\text{eq}}(r = 1)| \sim 1.25$  ( $\sim 0.12 \text{ N/m}^2$ ) до  $|\bar{\sigma}_{rz}^{\text{eq}}(r = 2)| \sim 0.55$  ( $\sim 0.55 \text{ N/m}^2$ ) соответственно. Во втором случае гибридной ориентации поля директора (см. (11б)) величина  $|\bar{\sigma}_{rz}(\tau, r)|$  также монотонно убывает по сечению ЖК-полости и характеризуется сменой знака величины  $\bar{\sigma}_{rz}(\tau, r)$  с положи-

тельного на отрицательный спустя промежуток времени, равный  $\sim 0.16$  ( $\sim 1.1$  s) после начала релаксационного процесса. Равновесное распределение сдвиговой компоненты ТН характеризуется небольшим перепадом величины  $\bar{\sigma}_{rz}^{\text{eq}}$  с  $|\bar{\sigma}_{rz}^{\text{eq}}(r=1)| \sim 0.75$  ( $\sim 0.07$  N/m<sup>2</sup>) на более холодной внутренней ограничивающей поверхности до  $\bar{\sigma}_{rz}^{\text{eq}}$  с  $|\bar{\sigma}_{rz}^{\text{eq}}(r=2)| \sim 0.37$  ( $\sim 0.04$  N/m<sup>2</sup>) на более теплой внешней ограничивающей поверхности. Следует отметить, что время релаксации величины  $\bar{\sigma}_{rz}(\tau, r)$  в ГОЖК-капилляре  $\tau_R$  составляет 0.64 ( $\sim 4.4$  s), что по крайней мере вдвое больше времени релаксации как поля директора, так и поля скорости  $\tau_R \sim \tau(7)$ .

#### 4. Заключение

Исследование релаксации как поля директора и скорости, так и температуры и сдвиговой компоненты тензора напряжений в гибридно-ориентированном ЖК-капилляре, выполненное в рамках модели классического несжимаемого жидкого кристалла, показало, что под действием градиента температуры  $\nabla T$ , направленного перпендикулярно ограничивающим поверхностям цилиндров, формируется стационарный гидродинамический поток, величина и направление которого зависят как от  $\nabla T$ , так и от характера сцепления ЖК-молекул с этими поверхностями. Численные расчеты показали, что изменение характера сцепления ЖК-молекул на более теплой ограничивающей поверхности цилиндра с гомеотропного на планарное и на менее теплой с планарного на гомеотропное приводит как к качественному, так и к количественному изменению характера релаксационного процесса для поля скорости, в результате чего формируются противоположно направленные стационарные гидродинамические потоки. Все это позволяет нам указать на ряд особенностей, связанных с реакцией ЖК-материалов на воздействие градиента температуры, учитываемых при создании наносенсоров или ЖК-дисплеев, в которых углеродные нанотрубки играют основную роль.

Таким образом, мы надеемся, что настоящее исследование дает ответы на некоторые вопросы, связанные с описанием релаксационных и гидродинамических процессов, протекающих в тонких ЖК-капиллярах под действием перепада температур.

#### Список литературы

- [1] P.E. Cladis, M. Kleman. *J. de Phys.* **33**, 591 (1972).
- [2] A. Corella-Madueno, A. Castellanos-Moreno, S. Gutierrez-Lopez, R.A. Rosas, J.A. Reyes. *Phys. Rev. E* **78**, 022 701 (2008).
- [3] J. Reyes, A. Corella-Madueno, C.I. Mendoza. *J. Chem. Phys.* **129**, 084 710 (2008).
- [4] R.B. Schoch, J. Han, P.H. Renaud. *Rev. Mod. Phys.* **80**, 839 (2008).
- [5] H.I. Chen, W. Lee, N.A. Clark. *Appl. Phys. Lett.* **90**, 033 501 (2007).
- [6] K.A. Park, S.M. Lee, S.H. Lee, Y.H. Lee. *J. Phys. Chem. C* **111**, 1620 (2007).
- [7] J. Lagerwall, G. Scalia, M. Haluska, U. Detlaff-Weglikowska, S. Roth, F. Giesselmann. *Adv. Mater.* **19**, 359 (2007).
- [8] A.V. Zakharov, A.A. Vakulenko. *J. Chem. Phys.* **127**, 084 907 (2007).
- [9] A.V. Zakharov, A.A. Vakulenko, S. Romano. *J. Chem. Phys.* **128**, 074 905 (2008).
- [10] A.B. Захаров, А.А. Вакуленко. *ФТТ* **50**, 557 (2008).
- [11] A.V. Zakharov, A.A. Vakulenko. *Phys. Rev. E* **79**, 011 708 (2009).
- [12] J.L. Ericksen. *Arch. Rat. Mech. Anal.* **4**, 231 (1960).
- [13] F.M. Leslie. *Arch. Rat. Mech. Anal.* **28**, 265 (1968).
- [14] A.B. Захаров, А.А. Вакуленко. *ФТТ* **51**, 1223 (2009).
- [15] P.P. Karat, N.V. Madhusudana. *Mol. Cryst. Liq. Cryst.* **40**, 239 (1977).
- [16] A.G. Chmielewski. *Mol. Cryst. Liq. Cryst.* **132**, 339 (1986).
- [17] P. Jamee, G. Pitsi, J. Thoen. *Phys. Rev. E* **66**, 021 707 (2002).
- [18] M. Marinelli, A.K. Ghosh, F. Mercuri. *Phys. Rev. E* **63**, 061 713 (2001).
- [19] R.S. Akopyan, R.B. Alaverdian, E.A. Santrosian, Y.S. Chilingarian. *J. Appl. Phys.* **90**, 3371 (2001).
- [20] И.С. Березин, Н.Р. Жидков. *Методы вычислений*. Физматгиз, М. (1964). 464 с.