

Ориентационная нематодинамика сжимаемой гибридной жидкокристаллической ячейки

© А.В. Захаров, А.А. Вакуленко

Институт проблем машиноведения Российской академии наук,
Санкт-Петербург, Россия

E-mail: avak2vale@mail.ru

(Поступила в Редакцию 2 июля 2008 г.

В окончательной редакции 26 ноября 2008 г.)

В рамках классической гидродинамики сжимаемых жидких кристаллов (ЖК) Эриксона–Лесли исследована релаксация полей директора, скорости, плотности и компонент тензора напряжений под действием градиента температуры ∇T , направленного перпендикулярно ограничивающим поверхностям гибридно-ориентированной ЖК (ГЖК)-ячейки. В случае нематического ЖК, образованного молекулами 4-*n*'-пентил-4'-цианобенил (5ЦБ), под действием ∇T в ГЖК-ячейке формируется стационарный гидродинамический поток, величина и направление которого зависят от величины и направления ∇T . Для случая нематика 5ЦБ изучен ряд релаксационных и гидродинамических режимов и определены времена релаксаций как полей директора и скорости, так и компонент тензора напряжений.

PACS: 61.30.Dk, 61.30.Pq

1. Введение

Технологический прогресс предъявляет все более жесткие требования к качеству и надежности жидкокристаллических (ЖК) ячеек, которые являются основным элементом таких электронных приборов, как дисплеи или ультрабыстрые оптические переключатели. Эти ЖК-ячейки в процессе эксплуатации подвергаются не только воздействию электромагнитных полей, но и механическим и тепловым воздействиям. Если влияние внешних электромагнитных полей на ЖК-фазу достаточно хорошо изучено как в рамках макро- или микроскопических теорий, так и экспериментальными методами, то воздействие градиентов температуры на ЖК-фазу изучено относительно слабо, невзирая на тот факт, что эти явления находятся в поле зрения исследователей с момента открытия ЖК в начале XX столетия [1]. Но в последнее время благодаря усилиям различных групп исследователей, как теоретиков, так и экспериментаторов, наметился определенный прогресс в исследовании влияния градиентов температуры как на структурные, так и динамические свойства нематиков [2–7] и холестериков [8–11]. Наличие градиента температуры ∇T в ЖК-фазе приводит к тому, что необходимо учитывать взаимодействие ∇T как с полем директора $\hat{n}(\mathbf{r})$, так и с полем скорости $\mathbf{v}(\mathbf{r})$, инициируемым градиентом температуры. Но все предыдущие исследования влияния ∇T на релаксационные и гидродинамические свойства ЖК-ячеек были выполнены в приближении несжимаемой жидкости, в то время как учет сжимаемости ЖК-фазы отражается на балансе как угловых, так и линейных моментов, действующих на единицу объема ЖК-фазы. Действительно, как было показано в [4,7], условие несжимаемости нематической ЖК (НЖК)-фазы совместно с условием отсутствия

скольжения на границах гибридно-ориентированной ЖК (ГЖК)-ячейки приводит к тому, что в ЖК-системе под действием градиента температуры, направленного перпендикулярно ограничивающим поверхностям, формируется стационарное течение параллельно этим поверхностям. На направление этого стационарного гидродинамического потока влияет в первую очередь направление градиента температуры. В случае несжимаемой жидкости профиль скорости в горизонтальном направлении по сечению ГЖК-ячейки характеризуется наличием ярко выраженного экстремума вблизи более теплой ограничивающей поверхности. В случае сжимаемой жидкости гидродинамическое течение имеет более сложный вид, поскольку в дополнение к горизонтальной существует и вертикальная составляющая вектора скорости; как следствие, процесс релаксации ЖК-системы к равновесному распределению принимает более сложный характер. Все это приводит к тому, что дополнительные вклады в выражение для диссипационной функции Рэлея позволяют получить более гладкие профили компонент поля скорости по всему сечению ГЖК-ячейки. Таким образом, общий учет всех сил, действующих на единицу объема ЖК-фазы, не только позволяет воссоздать более полную картину релаксации динамических характеристик этих электронных приборов, но и точнее оценить срок их активной эксплуатации.

В настоящей работе в рамках классической гидродинамики сжимаемых ЖК Эриксона–Лесли исследована релаксация полей директора, скорости и плотности, а также изменение поля температуры и компонент тензора напряжения к их равновесному распределению по сечению ГЖК-ячейки в зависимости от величины и направления вертикального градиента температуры.

2. Основные уравнения ориентационной нематодинамики для сжимаемой среды

Состояние сжимаемой ГЖК-ячейки, находящейся под действием градиента температуры $\nabla T(t, \mathbf{r})$, определяется полями директора $\hat{\mathbf{n}}(t, \mathbf{r})$, вектора скорости $\mathbf{v}(t, \mathbf{r})$, температуры $T(t, \mathbf{r})$ и плотности $\rho(t, \mathbf{r})$ нематика. Система уравнений, которая описывает гидродинамику сжимаемого ЖК, состоит из уравнения неразрывности, уравнения, описывающего баланс упругого $\mathbf{T}_{el}(t, \mathbf{r})$, вязкого $\mathbf{T}_{vis}(t, \mathbf{r})$ и термомеханического $\mathbf{T}_{tm}(t, \mathbf{r})$ моментов, действующих на единицу объема ЖК-фазы, уравнения, аналогичного уравнению Навье–Стокса, и уравнения теплопроводности для такой анизотропной системы, как НЖК [12–14]. Гибридная ориентация сжимаемой ЖК-ячейки предполагает, что на одной из ограничивающих поверхностей ячейки достигается гомеотропная ориентация директора, например $\hat{\mathbf{n}} \parallel \hat{\mathbf{k}}$ ($z = 0$), в то время как на другой — планарная ориентация директора: $\hat{\mathbf{n}} \perp \hat{\mathbf{k}}$ ($z = d$). Здесь вектор $\hat{\mathbf{k}}$ совпадает с направлением оси z , в то время как направление вектора $\hat{\mathbf{j}} = \hat{\mathbf{i}} \times \hat{\mathbf{k}}$ совпадает с направлением оси y . В дальнейшем будем полагать, что $\hat{\mathbf{n}}$ в процессе переориентации под действием градиента температуры всегда остается в плоскости xz , образованной направлением директора на верхней ограничивающей поверхности, совпадающей с направлением оси x и направлением градиента температуры, совпадающим с направлением оси z . Это позволяет нам считать все физические величины зависящими только от координаты z . С учетом всего изложенного выше выражение для директора принимает вид $\hat{\mathbf{n}} = \sin \theta(t, z) \hat{\mathbf{i}} + \cos \theta(t, z) \hat{\mathbf{k}}$, где $\theta(t, z)$ — полярный угол между направлением директора и нормалью $\hat{\mathbf{k}}$ к обеим границам. В дальнейшем будем предполагать, что градиент температуры $\nabla T(t, z) = \frac{\partial T(t, z)}{\partial z} \hat{\mathbf{k}}$ в ГЖК-ячейке задается перепадом температур $\Delta T = T_{up(lw)} - T_{lw(up)}$, где $T_{up(lw)}$ — температура, заданная на верхней (нижней) ограничивающей поверхности, $T_{lw(up)}$ — температура, заданная на нижней (верхней) ограничивающей поверхности, причем значения этих температур выбраны таким образом, что они принадлежат температурному интервалу, соответствующему нематической фазе. Уравнение неразрывности в нашем случае может быть записано в виде

$$\dot{\rho}_m + \rho_m(\nabla \cdot \mathbf{v}) = 0, \quad (1)$$

где вектор поля скорости $\mathbf{v}(t, z) = v_x(t, z) \hat{\mathbf{i}} + v_z(t, z) \hat{\mathbf{k}}$ имеет две компоненты: $v_x(t, z) \equiv u(t, z)$ и $v_z(t, z) \equiv w(t, z)$, а $\dot{\rho}_m = \rho_{m,t} + \rho_{m,z} w$, где $\rho_{m,t} = \frac{\partial \rho_m}{\partial t}$, а $\rho_{m,z} = \frac{\partial \rho_m}{\partial z}$. Отметим, что поле плотности в линейном приближении может быть записано в виде $\rho_m(t, z) = \rho_0 [1 - \alpha(T(t, z) - T_{lw(up)})]$, где $\alpha = \frac{1}{\rho_m} \left(\frac{\partial \rho_m}{\partial T} \right)_p$ — коэффициент объемного расширения нематика. Иссле-

дования динамики слоя нематика под действием градиента температуры для случая несжимаемого НЖК, когда плотность по сечению ГЖК-ячейки постоянна и равна $\rho_m = \rho_0$ [4,7], показали, что в процессе распространения тепла, движения нематика и переориентации поля директора следует различать несколько временных масштабов. Так, характерное время для описания процесса теплопроводности в направлении, перпендикулярном направлению директора, равно $t_T = \frac{\rho_0 C_p d^2}{\lambda_\perp}$, где C_p — теплоемкость нематика при постоянном давлении, λ_\perp — коэффициент теплопроводности нематика в направлении, перпендикулярном $\hat{\mathbf{n}}$. Время движения нематика описывается на масштабах времени $t_v = \frac{\rho_0 d^2}{\gamma_{10}}$, где $\gamma_{10} = \gamma_1(T = T_{lw(up)})$ — коэффициент вращательной вязкости нематика, соответствующий температуре $T_{lw(up)}$. Характерное время переориентации поля директора равно $t_d = \frac{\gamma_{10} d^2}{K_{10}}$, где $K_{10} = K_1(T = T_{lw(up)})$, K_1 — коэффициент продольной упругости Франка. Поскольку характерный размер ГЖК-ячейки колеблется в пределах от 10^{-6} до 10^{-4} м, а величина коэффициента Франка $K_1 \sim 10$ пН, мы имеем дело с иерархией масштабов времени $t_T \ll t_v \ll t_d$. Введем теперь безразмерное время $\tau = t/t_d$, тогда уравнение баланса моментов, действующих на единицу объема ЖК-фазы, принимает вид

$$\begin{aligned} \bar{\gamma}_1(\chi) \dot{\theta} &= \mathcal{A}(\theta) u_z + (\mathcal{G}(\theta) \theta_z)_z \\ &\quad - \frac{1}{2} \mathcal{G}_\theta(\theta) \theta_z^2 - \delta_1 \chi_z \theta_z \left(\frac{1}{2} + \sin^2 \theta \right), \end{aligned} \quad (2)$$

где z — безразмерная координата, $u = \frac{t_d}{d} v_x$ и $w = \frac{t_d}{d} v_z$ — безразмерные компоненты скорости в горизонтальном и вертикальном направлениях, $\mathcal{G}(\theta) = (K_1(\chi) \sin^2 \theta + K_3(\chi) \cos^2 \theta) / K_{10}$, $\mathcal{G}_\theta(\theta)$ — производная функции $\mathcal{G}(\theta)$ по θ , $\chi(\tau, z) = T(\tau, z) / T_{NI}$ — безразмерная температура, $\mathcal{A}(\theta) = \bar{\mathcal{A}}(\theta) / \gamma_{10} = \frac{1}{2} (\gamma_1(\chi) - \gamma_2(\chi) \cos 2\theta) / \gamma_{10}$, γ_i ($i = 1, 2$) — коэффициент вращательной вязкости нематика, $\bar{\gamma}_1 = \gamma_1 / \gamma_{10}$, K_1 и K_3 — коэффициенты упругости Франка, соответствующие продольной и поперечной деформациям, $\delta_1 = \xi T_{NI} / K_{10}$ — безразмерный параметр системы. Здесь $\xi \sim 10^{-12}$ Дж/м · К — термомеханическая постоянная [2], а T_{NI} — температура фазового перехода нематик–изотропная жидкость. Безразмерное уравнение баланса линейных моментов, действующих на единицу элементарного объема НЖК, имеет вид [4,7]

$$\delta_2 \rho \dot{w}(\tau, z) = \partial_z \sigma_{zz}, \quad (3)$$

$$\delta_2 \rho \dot{u}(\tau, z) = \partial_z \sigma_{zx}, \quad (4)$$

где $\rho \equiv \rho(\tau, z) = \rho_m(\tau, z) / \rho_0$ — безразмерная плотность материала, $\sigma_{zi} = \sigma_{zi}^v + \sigma_{zi}^e$ ($i = x, z$) — сдвиговая и нормальная компоненты тензора напряжений, $\sigma_{zx}^v(\tau) = \frac{\delta \mathcal{R}(\tau)}{\delta u_z}$ и $\sigma_{zz}^v(\tau) = \frac{\delta \mathcal{R}(\tau)}{\delta w_z}$ — вязкие вклады в тензор напряжений, а

$\sigma^e = -\frac{\partial W_F}{\partial \nabla \mathbf{n}} \times (\nabla \mathbf{n})^T$ — тензор упругих напряжений.

Для случая сжимаемого нематика функция Рэлея принимает вид $\mathcal{R}(\tau, z) = \mathcal{R}^v(\tau, z) + \delta_1 \mathcal{R}^{\text{tm}}(\tau, z) + \delta_3 \mathcal{R}^{\text{th}}(\tau, z)$, где $\mathcal{R}^v(\tau, z)$ — вязкий, $\mathcal{R}^{\text{tm}}(\tau, z)$ — термомеханический и $\mathcal{R}^{\text{th}}(\tau, z)$ — термический вклады в диссипационную функцию. В случае сжимаемой жидкости вязкий и термомеханический вклады в $\mathcal{R}(\tau, z)$ -функцию могут быть записаны в виде суммы, состоящей из диссипационных вкладов, соответствующих несжимаемой и сжимаемой средам $\mathcal{R}^v(\tau, z) = \mathcal{R}_0^v(\tau, z) + \mathcal{R}_c^v(\tau, z)$ и $\mathcal{R}^{\text{tm}}(\tau, z) = \mathcal{R}_0^{\text{tm}}(\tau, z) + \mathcal{R}_c^{\text{tm}}(\tau, z)$. Здесь $\mathcal{R}_0^v(\tau, z) = \frac{1}{2} h(\theta) u_z^2 - \mathcal{A}(\theta) \theta_\tau u_z + \frac{1}{2} \bar{\gamma}_1 \theta_\tau^2$ — вязкий вклад в диссипационную функцию, соответствующий несжимаемой жидкости, а $\mathcal{R}_c^v(\tau, z) = \mathcal{A}(\theta) u_z \theta_z w + \bar{\gamma}_1 \theta_\tau \theta_z w + \frac{1}{2} \bar{\gamma}_1 \theta_z^2 w^2 + \frac{\beta_0}{6} u_z w_z \sin 2\theta + (\frac{\beta_0}{18} + \frac{1}{2} \xi_v) w_z^2$ — вязкий вклад в $\mathcal{R}(\tau, z)$, соответствующий сжимаемой жидкости. Термомеханический вклад в функцию Рэлея, соответствующий несжимаемой жидкости, равен $\mathcal{R}_0^{\text{tm}}(\tau, z) = \theta_\tau \theta_z \chi_z (\frac{1}{2} + \sin^2 \theta) - \frac{3}{2} u_z \theta_z \chi_z \sin^2 \theta$, в то время как вклад в эту же функцию, обусловленный сжимаемостью, равен $\mathcal{R}_c^{\text{tm}}(\tau, z) = -\frac{1}{4} \chi_z w_z \theta_z \sin 2\theta + \theta_z^2 w \chi_z (\frac{1}{2} + \sin^2 \theta)$. Термический вклад в функцию Рэлея имеет такой же вид, как и в случае несжимаемой жидкости, и равен $\mathcal{R}^{\text{th}}(\tau, z) = \frac{1}{2\chi} (\lambda \cos^2 \theta + \sin^2 \theta) \chi_z^2$. Функция $h(\theta)$ имеет вид $h(\theta) = [\alpha_1(\chi) \sin^2 \theta \cos^2 \theta + \frac{1}{2} (\alpha_6(\chi) \sin^2 \theta + \alpha_5(\chi) \cos^2 \theta) + \frac{1}{2} \alpha_4(\chi)] / \gamma_{10} - \mathcal{A}(\theta)$. В этих выражениях функции $\alpha_i(\chi)$ ($i = 1, \dots, 6$) являются зависящими от температуры коэффициентами Лесли, $\lambda = \lambda_{\parallel} / \lambda_{\perp}$, где λ_{\parallel} и λ_{\perp} — коэффициенты теплопроводности нематика вдоль и поперек направления директора, $\beta_0 = (\alpha_1 + \alpha_5 + \alpha_6 + \frac{3}{2} \alpha_4) / \gamma_{10}$, а ξ_v — безразмерный коэффициент вязкости. Два дополнительных параметра системы δ_1 и δ_3 имеют вид $\delta_2 = t_v / t_d$ и $\delta_3 = T_{\text{NI}} \lambda_{\perp} t_d^2 / d^2 \gamma_{10}$. Поскольку в нашем случае мы имеем дело с малыми градиентами температуры $|\nabla T|$ ($\sim 0.05 \text{ K}/\mu\text{m}$), можно ожидать, что температурное поле $\chi(\tau, z)$ удовлетворяет безразмерному уравнению теплопроводности [4,7]

$$\delta_4 \partial_\tau \chi(\tau, z) = -q_z, \quad (5)$$

где $q = -\chi \frac{\partial \mathcal{R}(\tau, z)}{\partial \chi_z}$ — проекция потока тепла поперек слоя НЖК, а $\delta_4 = t_T / t_d$ — еще один параметр системы. С учетом выражения для полной безразмерной диссипационной функции Рэлея $\mathcal{R}(\tau, z)$ последнее уравнение может быть переписано в виде

$$\delta_4 \partial_\tau \chi(\tau, z) = \left[\chi_z \left(\Lambda \cos^2 \theta + \sin^2 \theta \right) + \delta_5 \chi \theta_z \left(\theta (1/2 + \sin^2 \theta) - u_z \sin^2 \theta \left(1 + \frac{1}{2} \sin^2 \theta \right) \right) \right]_z, \quad (6)$$

где $\delta_5 = \delta_1 / \delta_3$.

Для того чтобы уравнения баланса угловых и линейных моментов, действующих на единицу объема нематика, и уравнение баланса энтропии представляли собой замкнутую систему уравнений, для описания гидродинамики сжимаемого НЖК необходимо дополнить эту систему уравнением состояния. Такое уравнение в приближении Буссинеска [15], связывающее плотность, давление и температуру, может быть записано в виде

$$\rho(\tau, z) = 1 - \delta_5 (\chi(\tau, z) - \chi_{\text{up}(lw)}), \quad (7)$$

где $\delta_5 = \alpha T_{\text{NI}}$ — безразмерный параметр, а $\chi_{\text{up}(lw)} = T_{\text{up}(lw)} / T_{\text{NI}}$.

Для решения системы (2)–(4), (6)–(7) нам необходимы граничные и начальные условия как для полярного угла θ , так и для скоростей u и w . Для этого рассмотрим случай жесткого сцепления ЖК-молекул с обеими ограничивающими поверхностями. Предположим, что на верхней ограничивающей поверхности реализуется планарная, а нижней — гомеотропная ориентация директора. Это позволяет записать граничные условия для полярного угла в виде

$$\theta(z)_{z=0} = 0, \quad \theta(z)_{z=1} = \frac{\pi}{2}. \quad (8)$$

Начальное условие выберем в виде $\theta(0, z) = \frac{\pi}{2} z$ ($0 < z < 1$) и позволим системе релаксировать к равновесному распределению $\theta_{\text{eq}}(z)$ по всему сечению ГЖК-ячейки. Граничные условия для обеих скоростей в случае отсутствия скольжения на ограничивающих поверхностях принимают вид

$$u(z)_{z=0} = u(z)_{z=1} = w(z)_{z=0} = w(z)_{z=1} = 0. \quad (9)$$

Теперь мы располагаем всем необходимым для того, чтобы исследовать релаксационные процессы, протекающие в сжимаемых ГЖК-ячейках под действием градиента температуры, направленного перпендикулярно ограничивающим поверхностям. Сначала проведем качественный анализ уравнений (2)–(4), (6), (7) и для этого рассчитаем значения всех параметров δ_i ($i = 1, \dots, 5$). Для нематика 4- n' -пентил-4'-цианобензил (5ЦБ) в области температур существования нематической фазы $0.97 < \chi < 0.9862$ ($298 < T < 307.5 \text{ K}$) плотность ЖК ρ_0 равна $10^3 \text{ kg}/\text{m}^3$, а значения экспериментальных данных для упругой постоянной K_{10} и вязкости γ_{10} составляют $K_{10} \sim 13 \text{ pN}$ [16] и $\gamma_{10} = 0.077 \text{ Pa} \cdot \text{s}$ [17] соответственно. В дальнейшем используются зависимости шести коэффициентов Лесли (в $\text{Pa} \cdot \text{s}$) и двух упругих коэффициентов Франка (в pN) $K_1(T)$ и $K_3(T)$ от температуры, приведенные в работах [16] и [17] соответственно. Значения теплоемкости [18] $C_p = 10^3 \text{ J}/\text{kg} \cdot \text{K}$ и коэффициентов теплопроводности [19] $\lambda_{\parallel} = 0.24$ и $\lambda_{\perp} = 0.13 \text{ W}/\text{m} \cdot \text{K}$ были получены калориметрическими методами, а значение термомеханического коэффициента [2] $\xi = 10^{-12} \text{ J}/\text{m} \cdot \text{K}$ — экспериментально с помощью измерения максимальной скорости течения в

ГЖК-ячейке. Значения коэффициента объемного расширения и коэффициента объемной вязкости были выбраны равными $\alpha \sim 10^{-3} \text{ K}^{-1}$ и $\xi_v \sim 0.2 \text{ Pa} \cdot \text{s}$ [20] соответственно, а размер ГЖК-ячейки равен $d = 100 \mu\text{m}$. Набор указанных величин позволяет оценить все параметры δ_i ($i = 1, \dots, 5$): $\delta_1 \sim 24$, $\delta_2 \sim 2 \cdot 10^{-6}$, $\delta_3 \sim 6 \cdot 10^{-4}$, $\delta_4 \sim 2 \cdot 10^{-9}$ и $\delta_5 \sim 0.3$ соответственно. С учетом малости параметра $\delta_2 \ll 1$ уравнения (3) и (4) принимают вид

$$\sigma_{zx} = h(\theta)u_z - \mathcal{A}(\theta)\dot{\theta} - \frac{3}{2}\delta_1\chi_z\theta_z \sin^2\theta + \frac{\beta_0}{6}w_z \sin 2\theta = C_1(\tau), \quad (10)$$

$$\sigma_{zz} = \frac{\beta_0}{6} \left(u_z \sin 2\theta + \frac{2}{3} w_z \right) + \xi_v w_z - \frac{\delta_1}{4} \chi_z \theta_z \sin 2\theta - \mathcal{G}(\theta)\theta_z^2 = C_2(\tau), \quad (11)$$

где значения $C_1(\tau)$ и $C_2(\tau)$ не зависят от пространственной переменной z и будут определены исходя из граничных условий (9). Уравнение теплопроводности (6) с учетом того, что параметры δ_3 и $\delta_4 \ll 1$, принимает вид

$$\left[\chi_z (\lambda \cos^2 \theta + \sin^2 \theta) \right]_z = 0. \quad (12)$$

Решение последнего уравнения (12) может быть записано в виде

$$\chi(\tau, z) = \frac{\Delta\chi}{I} \int_0^z (\lambda \cos^2 \theta + \sin^2 \theta)^{-1} dz + \chi_{\text{up}(Iw)}, \quad (13)$$

где $I = \int_0^1 (\lambda \cos^2 \theta + \sin^2 \theta)^{-1} dz$, $\Delta\chi = (T_{\text{up}(Iw)} - T_{\text{lw}(up)})/T_{\text{NI}}$ соответственно.

3. Ориентационная релаксация поля директора, скорости и температуры в сжимаемой ГЖК-ячейке

Релаксация поля директора \hat{n} к его равновесному положению \hat{n}_{eq} , которая описывается полярным углом $\theta(\tau, z)$ из начального положения $\theta(\tau = 0, z) = \frac{\pi}{2}z$ к $\theta_{\text{eq}}(z)$ и обеих скоростей $u(\tau, z)$ и $w(\tau, z)$, для случая сильного сцепления молекул ЖК с ограничивающими поверхностями и направления градиента температуры от нижней поверхности ($\chi_{z=0} = 0.97$ ($\sim 298 \text{ K}$)) к верхней ($\chi_{z=1} = 0.9862$ ($\sim 303 \text{ K}$)) была исследована численно методом релаксации [21] и представлена на рис. 1. Кривые на рис. 1, *b* соответствуют релаксации $\theta(\tau, z)$ по всему сечению ГЖК-ячейки, начиная с момента времени $\tau(1) = 0.1$ ($\sim 7 \text{ s}$) (кривая 1) и до $\tau(4) = 0.4$ ($\sim 35 \text{ s}$) (кривая 4). Эти кривые получены посредством решения системы безразмерных нелинейных дифференциальных уравнений в частных производных (2)–(4),

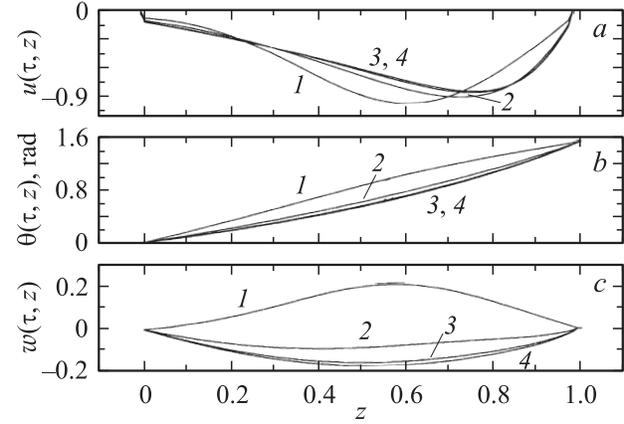


Рис. 1. Релаксация безразмерных компонент поля скорости $u(\tau, z)$ (a) и $w(\tau, z)$ (c), а также полярного угла $\theta(\tau, z)$ (b) к их равновесным распределениям по сечению ГЖК-ячейки в моменты времени $\tau = 0.1$ (1), 0.2 (2), 0.3 (3), $\tau_R = 0.4$ (4). Перепад температур от $\chi_{z=0} = 0.97$ до $\chi_{z=1} = 0.9862$.

(6), (7) для случая, когда граничные условия удовлетворяют уравнениям (8) и (9). Кривые на рис. 1, *a, c* описывают релаксацию компонент поля скорости $u(\tau, z)$ и $w(\tau, z)$ соответственно по всему сечению этой же ГЖК-ячейки и при тех же граничных условиях. Перепад безразмерной температуры $\Delta\chi = 0.0162$ соответствует перепаду температуры в $\sim 5 \text{ K}$, а время релаксации $\tau_R = 0.4$ ($\sim 28 \text{ s}$). Результаты вычислений показали, что распределение скоростей $u(\tau, z)$ и $w(\tau, z)$ по сечению ГЖК-ячейки характеризуется максимумом вблизи центра ЖК-ячейки, а сам гидродинамический поток направлен в отрицательном направлении как вдоль оси x , так и оси z . Причем на заключительной стадии эволюции компонента скорости w , направленная вдоль оси z , изменила направление с положительного (с начала релаксационного процесса и вплоть до времени $\tau(1) = 0.1$ ($\sim 7 \text{ s}$)) на отрицательное, и максимальная величина $|w|$ достигла значения ~ 0.2 ($\sim 0.3 \mu\text{m/s}$). В то же время максимальная величина $|u|$ достигла значения ~ 0.7 ($\sim 1 \mu\text{m/s}$) спустя $\tau_R = 0.4$ ($\sim 28 \text{ s}$). Расчет релаксации поля температуры показал, что $\chi(\tau, z)$ эволюционирует к своему равновесному распределению по сечению ГЖК-ячейки в соответствии с принятой нами иерархией времен значительно быстрее, чем поле скорости ($\Delta\tau \sim 10^{-2}$ ($\sim 1 \text{ s}$)). Релаксацию поля плотности с учетом линейной зависимости между полем температуры и плотности, описанную уравнением (7), следует ожидать такой же, как и для поля температуры. Эти расчеты представлены на рис. 2, *b*. Отметим, что во всех описанных выше случаях образец нематика 5ЦБ прогревался сверху ($\chi_{\text{up}} > \chi_{\text{lw}}$), а критерием сходимости итерационной процедуры была выбрана величина $\epsilon = |(\theta_{(m+1)}(\tau, z) - \theta_{(m)}(\tau, z)) / \theta_{(m)}(\tau, z)| \sim 10^{-4}$. Здесь m — номер итерации. Характер релаксационных процессов для поля директора и поля скорости меняется на противоположный с изменением градиента тем-

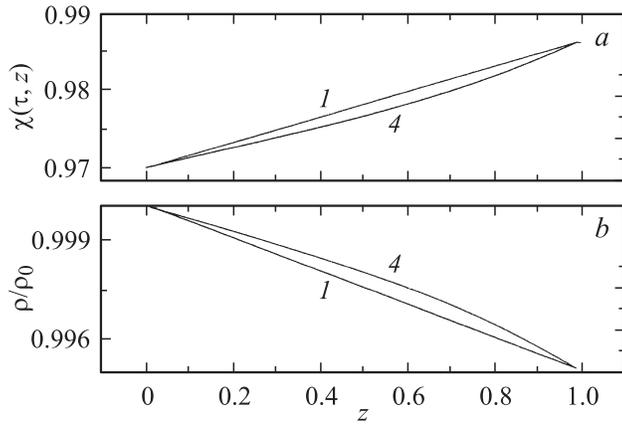


Рис. 2. Эволюция безразмерных полей температуры $\chi(\tau, z)$ (a) и плотности $\rho(\tau, z)$ (b) к их равновесным распределениям по сечению ГЖК-ячейки. Обозначения те же, что на рис. 1.

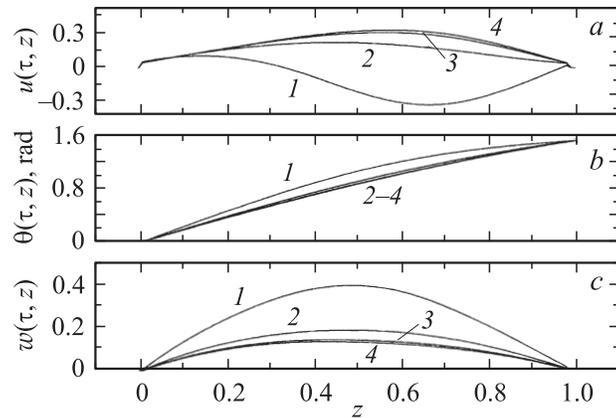


Рис. 3. Релаксация безразмерных компонент поля скорости $u(\tau, z)$ (a) и $w(\tau, z)$ (c), а также полярного угла $\theta(\tau, z)$ (b) к их равновесным распределениям по сечению ГЖК-ячейки в моменты времени $\tau = 0.1$ (1), 0.2 (2), 0.3 (3), $\tau_R = 0.5$ (4). Перепад температур от $\chi_{z=1} = 0.97$ до $\chi_{z=0} = 0.9862$.

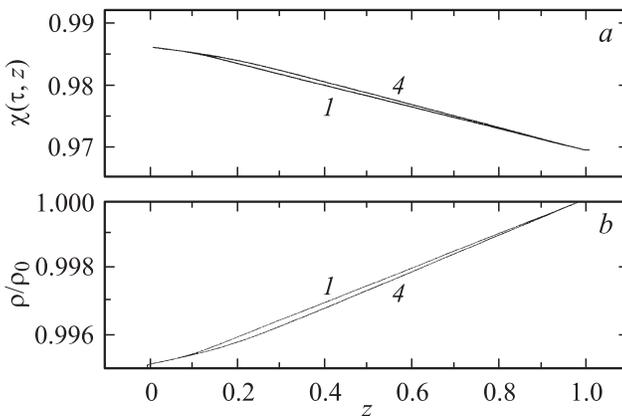


Рис. 4. Эволюция безразмерных полей температуры $\chi(\tau, z)$ (a) и плотности $\rho(\tau, z)$ (b) к их равновесным распределениям по сечению ГЖК-ячейки. Обозначения те же, что на рис. 3.

пературы. В случае температурного режима „теплая нижняя $\chi_{z=0} = 0.9862$ (~ 303 К) и холодная верхняя $\chi_{z=1} = 0.97$ (~ 298 К) ограничивающие поверхности“ устанавливается стационарное гидродинамическое течение с положительными проекциями вектора скорости. На рис. 3, a, c представлены результаты расчета компонент вектора скорости $u(\tau, z)$ и $w(\tau, z)$ соответственно. Как и в первом случае, эти скорости достигают максимального значения вблизи середины ГЖК-ячейки. Так, на заключительной стадии релаксационного процесса $v_{\max} \sim 0.3$ ($\sim 0.4 \mu\text{m/s}$), в то время как $w_{\max} \sim 0.1$ ($\sim 0.14 \mu\text{m/s}$) и достигается спустя время $\tau_R = 0.5$ (~ 35 s) при разности температур $\Delta\chi = 0.0162$ (~ 5 К). Распределение поля директора, представленное на рис. 3, b, близко к линейному по всему сечению ГЖК-ячейки с незначительным отклонением в сторону направления поля скорости. Равновесное распределение обоих полей $\chi(\tau, z)$ и $\rho(\tau, z)$ также близко к линейному и представлено на рис. 4, a, b соответственно.

Сравнивая характер релаксации поля скорости для случая сжимаемого и несжимаемого НЖК [4,7], можно сделать вывод, что учет сжимаемости анизотропной жидкости существенно меняет характер релаксации поля скорости. Это обусловлено прежде всего тем, что в случае сжимаемой жидкости механизм релаксации поля скорости получает дополнительную степень свободы, выразившуюся в существовании вертикальной компоненты скорости w . Поэтому в данном случае диссипационная функция Рэлея включает в себя дополнительные вклады, обусловленные как вязкими, так и термомеханическими силами. В результате характер релаксации поля скорости в случае сжимаемой жидкости носит более сглаженный по сравнению со случаем несжимаемой жидкости характер. Происходящее при этом перераспределение потоков приводит к уменьшению величины горизонтальной составляющей стационарного гидродинамического потока.

4. Ориентационная релаксация компонент тензора напряжений

Теперь исследуем релаксацию компонент тензора напряжений σ_{ij} в сжимаемой ГЖК-ячейке, основываясь на выражениях для диссипационной функции Рэлея [4,7]

$$\sigma_{zx}(\tau) = \partial\mathcal{R}(\tau)/\partial u_z, \quad (14)$$

$$\sigma_{zz}^v(\tau) = \partial\mathcal{R}(\tau)/\partial w_z, \quad (15)$$

где $\sigma_{zx} = \sigma_{zx}^v + \sigma_{zx}^e$ и $\sigma_{zx}^e = 0$ — вклад в полное выражение для сдвиговой компоненты тензора напряжений, обусловленный упругими силами. Располагая значениями σ_{zx} и используя соотношение $\sigma_{zx}(\tau) - \sigma_{xz}(\tau) = \partial\mathcal{R}(\tau)/\partial\theta$, можем рассчитать другую сдвиговую компоненту тензора напряжения σ_{xz}

$$\sigma_{xz}(\tau) = \sigma_{zx}(\tau) - (\mathcal{G}(\theta)\theta_z)_z + \frac{1}{2}\mathcal{G}_\theta(\theta)\theta_z^2 \quad (16)$$

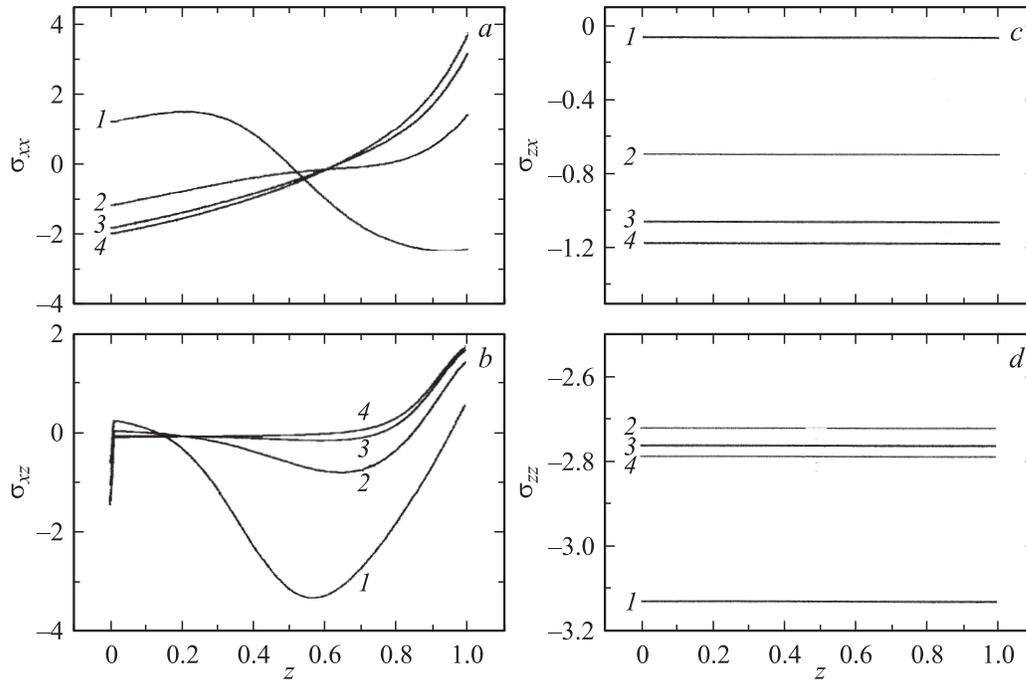


Рис. 5. Релаксация компонент тензора напряжений $\sigma_{xx}(\tau, z)$ (a), $\sigma_{xz}(\tau, z)$ (b), $\sigma_{zx}(\tau, z)$ (c), $\sigma_{zz}(\tau, z)$ (d) к их равновесным распределениям по сечению ГЖК-ячейки в те же моменты времени, что и на рис. 1. Температурный перепад между границами ячейки от $\chi_{z=0} = 0.97$ до $\chi_{z=1} = 0.9862$.

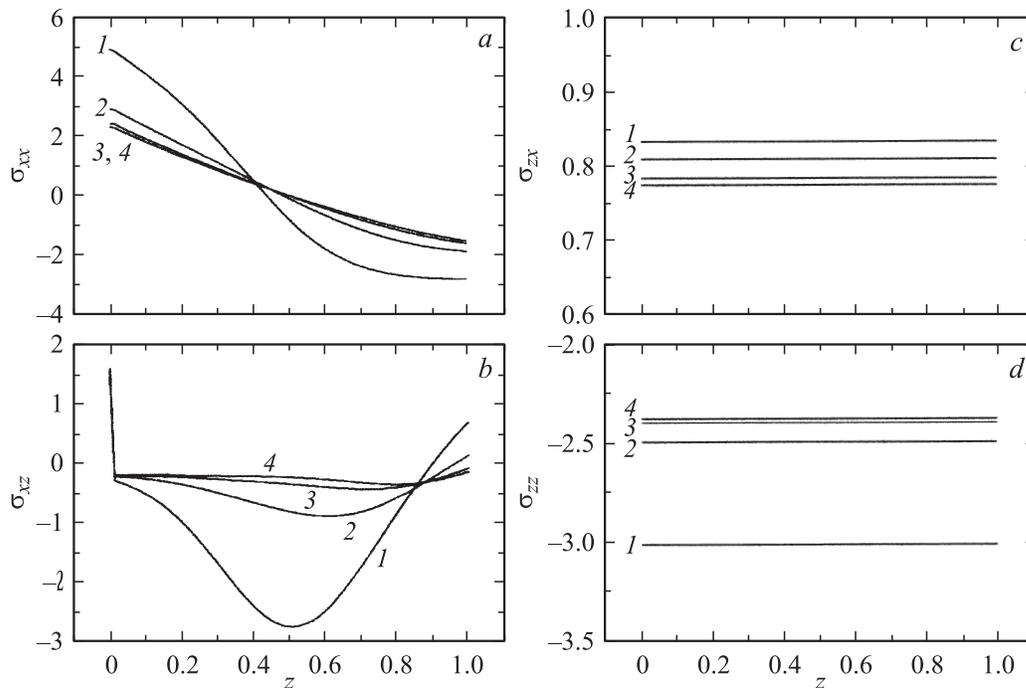


Рис. 6. Релаксация компонент тензора напряжений $\sigma_{xx}(\tau, z)$ (a), $\sigma_{xz}(\tau, z)$ (b), $\sigma_{zx}(\tau, z)$ (c), $\sigma_{zz}(\tau, z)$ (d) к их равновесным распределениям по сечению ГЖК-ячейки в те же моменты времени, что и на рис. 3. Температурный перепад от $\chi_{z=0} = 0.97$ до $\chi_{z=1} = 0.9862$.

и обе нормальные компоненты тензора σ_{ij} как

$$\sigma_{zz}(\tau, z) = \sigma_{zz}^v(\tau, z) - \mathcal{G}(\theta)\theta_z^2, \quad (17)$$

так и

$$\sigma_{xx}(\tau, z) = \sigma_{xx}^v(\tau, z). \quad (18)$$

Результаты расчета эволюции компонент тензора напряжений $\sigma_{xx}(\tau, z)$, $\sigma_{xz}(\tau, z)$, $\sigma_{zx}(\tau, z)$ и $\sigma_{zz}(\tau, z)$ по сечению ГЖК-ячейки от более холодной нижней ($\chi_{z=0} = 0.97$) к более теплой верхней границе ($\chi_{z=1} = 0.9862$) для случая $\Delta\chi = 0.0162$ и различных моментов времени, начиная от $\tau(1) = 0.1$ (~ 7 s) (кривая 1) и до $\tau(4) = 0.4$ (~ 35 s) (кривая 4), представлены на рис. 5, *a-d* соответственно. Равновесное распределение значений нормальной $\sigma_{xx}(z)$ (*a*) и сдвиговой $\sigma_{xz}(z)$ (*b*) компонент характеризуется сменой знака с отрицательного (вблизи более холодной) на положительный (вблизи более теплой ограничивающей поверхности), в то время как функции $\sigma_{zx}(z)$ (*c*) и $\sigma_{zz}(z)$ (*d*), согласно уравнениям (10) и (11), постоянны по всему сечению ГЖК-ячейки. Характер релаксационного процесса как нормальной $\sigma_{xx}(\tau, z)$, так и сдвиговой $\sigma_{xz}(\tau, z)$ компоненты тензора меняется на противоположный с изменением направления градиента температуры (рис. 6, *a-d*). Так, в случае более теплой нижней ($\chi_{z=0} = 0.9862$) и более холодной верхней ($\chi_{z=1} = 0.97$) ограничивающих поверхностей устанавливаются стационарные распределения $\sigma_{xx}(z)$ (*a*) и $\sigma_{xz}(z)$ (*b*), характеризующиеся положительными значениями вблизи $z = 0$ и отрицательными вблизи $z = 1$. При этом смена знака $\sigma_{xx}(z)$ была отмечена вблизи середины ГЖК-ячейки, в то время как функция $\sigma_{xz}(z)$ меняет знак вблизи более теплой ограничивающей поверхности ячейки. Такое поведение равновесных распределений компонент тензора напряжений σ_{ij} ($i, j = x, z$) по сечению ГЖК-ячейки свидетельствует о том, что на величину напряжений оказывают большое влияние величина и направление градиента температуры.

5. Заключение

Исследование релаксации как поля директора, скорости и плотности, так и компонент тензора напряжений в гибридно-ориентированной жидкокристаллической ячейке, выполненное в рамках классической гидродинамики сжимаемого жидкого кристалла, показало, что под действием градиента температуры ∇T , направленного перпендикулярно ограничивающим поверхностям ГЖК-ячейки, формируется стационарный гидродинамический поток, величина и направление которого зависят от величины и направления ∇T . Численные исследования показали, что учет сжимаемости ЖК-фазы приводит к более гладким по сравнению со случаем несжимаемого ЖК профилям распределения компонент стационарного вектора скорости по сечению ГЖК-ячейки. В случае

сжимаемой ЖК-фазы стационарное течение, генерируемое градиентом температуры, состоит как из горизонтальной, так и вертикальной компонент, чем отличается от несжимаемой ЖК-среды, характеризующейся наличием только горизонтально направленного стационарного потока. В случае сжимаемой анизотропной жидкости механизм, ответственный за возникновение более сложной релаксационной картины, обусловлен диссипационной функцией Рэлея, включающей в себя дополнительные вклады сил как вязкой, так и термомеханической природы. Наше исследование также указывает на то, что модель несжимаемой ЖК-фазы применима в случае тонких (от 1 до $10 \mu\text{m}$) ячеек, где плотность ЖК-фазы практически постоянна по сечению ЖК-ячейки, в то время как в случае толстых ЖК-ячеек ($\sim 100 \mu\text{m}$) необходим учет сжимаемости ЖК-фазы.

Таким образом, мы надеемся, что настоящая работа позволит дать ответы на некоторые вопросы, связанные с описанием релаксационных и гидродинамических процессов, протекающих в толстых ГЖК-ячейках.

Список литературы

- [1] P.G. de Gennes, J. Prost. The physics of liquid crystals. Oxford University Press, Oxford (1995). 616 p.
- [2] R.S. Akopyan, R.B. Alaverdian, E.A. Santosian, Y.S. Chilingarian. J. Appl. Phys. **90**, 3371 (2001).
- [3] R.S. Hakobyan, G.L. Yesayan, B.Ya. Zeldovich. Phys. Rev. E **73**, 061 707 (2006).
- [4] A.V. Zakharov, A.A. Vakulenko. J. Chem. Phys. **127**, 084 907 (2007).
- [5] A.V. Zakharov, A.A. Vakulenko, Silvano Romano. J. Chem. Phys. **128**, 074 905 (2008).
- [6] A.V. Zakharov, A.A. Vakulenko. Chem. Phys. Lett. **454**, 80 (2008).
- [7] A.B. Захаров, А.А. Вакуленко. ФТТ **50**, 557 (2008).
- [8] A. Dequidt, P. Oswald. Europhys. Lett. **80**, 26 001 (2007).
- [9] A. Dequidt, A. Zywockinski, P. Oswald. Eur. Phys. J. E **25**, 277 (2008).
- [10] P. Oswald, A. Dequidt. Phys. Rev. Lett. **100**, 217 802 (2008).
- [11] P. Oswald, A. Dequidt. Europhys. Lett. **83**, 16 005 (2008).
- [12] J.L. Ericksen. Arch. Ration. Mech. Anal. **4**, 231 (1960).
- [13] F.M. Leslie. Arch. Ration. Mech. Anal. **28**, 265 (1968).
- [14] Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. Гидродинамика. Наука, М. (1988). 733 с.
- [15] R. Graham. Phys. Rev. A **10**, 1762 (1974).
- [16] N.V. Madhusudana, R.P. Pratibha. Mol. Cryst. Liq. Cryst. **89**, 249 (1982).
- [17] A.G. Chmielewski. Mol. Cryst. Liq. Cryst. **132**, 339 (1986).
- [18] P. Jamee, G. Pitsi, J. Thoen. Phys. Rev. E **66**, 021 707 (2002).
- [19] M. Marinelli, A.K. Ghosh, F. Mercuri. Phys. Rev. E **63**, 061 713 (2001).
- [20] W. Wedler. Physical properties of liquid crystals / Eds D. Demus, J. Goodby, G.W. Gray, H.-W. Spiess, W. Vill. Wiley-VCH, Weinheim (1999). 503 p.
- [21] И.С. Березин, Н.Р. Жидков. Методы вычислений. Физматгиз, М. (1964). 464 с.