# Влияние внешних полей на ориентационную релаксацию нематиков

© А.В. Захаров, А.А. Вакуленко

Институт проблем машиноведения Российской академии наук,
199178 Санкт-Петербург, Россия

E-mail: avak@microm.ipme.ru

(Поступила в Редакцию 19 сентября 2006 г.
В окончательной редакции 4 декабря 2006 г.)

Релаксация поля директора $\hat{\mathbf{n}}$ и поля скорости $\mathbf{v}$, а также сдвиговых и нормальных компонент тензора напряжений были исследованы теоретически посредством численного решения системы нелинейных гидродинамических уравнений, описывающих переориентацию директора с учетом поля скоростей, инициируемых вращением поля директора. Время релаксации и влияние поля скорости на процессы релаксации были исследованы для ряда гидродинамических режимов, возникающих в жидкокристаллической ячейке под действием внешних электрического и магнитного полей.

PACS: 61.30.Cz, 64.70.Md

## 1. Введение

В последнее время большое внимание уделяется физическим свойствам жидких кристаллов (ЖК) в наноскопических объемах [1,2]. Это в первую очередь обусловлено широким применением ЖК в современных электронных приборах. С учетом того, что границы ЖК-ячейки искажают структурные и оптические свойства ЖК-фазы, исследование этих свойств вблизи ограничивающих поверхностей представляет как академический, так и прикладной интерес. Изучение релаксационных процессов, возникающих в ЖК-фазах ограниченного объема под действием внешних и поверхностных сил, несомненно также имеет практическое значение [1,2]. Возмущенное действием внешних электрического и магнитного полей распределение поля директора $\hat{\mathbf{n}}(t, \mathbf{r})$ в ограниченном объеме ЖК релаксирует к его равновесному состоянию $\hat{\mathbf{n}}_{\rm eq}(\mathbf{r})$, при котором директор образует с границей раздела ЖК-поверхность ячейки равновесный угол $\theta_{\rm eq}(\mathbf{r})$. В рамках классической гидродинамики ЖК Эриксена–Лесли [3,4] эволюцию угла $\theta(t, \mathbf{r})$ к его равновесному значению $\theta_{\rm eq}(\mathbf{r})$ можно рассчитать, основываясь на уравнении равновесия моментов электрических, магнитных, гидродинамических и упругих сил, действующих на единицу объема ЖК-фазы [5,6]. В том случае, когда внешние силы, обусловленные электрическими и магнитными полями, преобладают над остальными силами, такое описание с большой точностью воспроизводит релаксацию поля директора к его равновесному значению. Но всякий физический процесс, обусловленный переориентацией директора, инициирует поле скоростей $\mathbf{v}(t, \mathbf{r})$ в ЖК-фазе, которое, в свою очередь, взаимодействует с полем деформаций директора $\hat{\mathbf{n}}(t, \mathbf{r})$. Это так называемый эффект обратного течения (ОТ) [7]. В случае малых переориентаций поля директора эффект ОТ может быть учтен перенормировкой коэффициента вращательной вязкости $\gamma_1$ [8]. Более точно этот эффект может быть рассчитан в рамках полного гидродинамического описания такой системы, подразумевающего решение системы уравнений, описывающих баланс моментов, и аналог уравнения Навье–Стокса для такой анизотропной среды как нематический ЖК. Недавно были предприняты попытки учета влияния эффекта ОТ на оптические свойства ЖК-ячейки с помощью численного исследования системы уравнений для двух полей: поля скоростей и поля деформаций директора [9], но учет влияния этого эффекта на процессы релаксации не только поля деформаций директора, но и поля скоростей, компонент тензора напряжений и сдвиговой вязкости впервые произведен в настоящей работе. Следует отметить, что экспериментальные исследования процессов переориентации поля директора в ЖК-ячейках успешно проводятся методом ЯМР-спектроскопии [5,6]. Это достигается следующим образом: вначале образец ЖК-фазы ориентируется магнитным полем $\mathbf{B}$ с соответствующим расщеплением квадрупольного спектра $\Delta\overline{\nu}_0$. В какой-то момент включается сильное поперечное электрическое поле $\mathbf{E}$, которое ведет к убыванию величины расщепления квадрупольного спектра $\Delta\overline{\nu}(t)$. При этом величина $\Delta\overline{\nu}(t)/\Delta\overline{\nu}_0$ связана с углом $\theta'(t)$ отклонения поля директора от направления магнитного поля (рис. 1) соотношением $\Delta\overline{\nu}(t)/\Delta\overline{\nu}_0 = P_2\big(\cos\big(\theta'(t)\big)\big)$, где $P_2\big(\cos(\theta'(t))\big)$ — полином Лежандра второго порядка. Таким образом, ЯМР-спектроскопия позволяет проследить эволюцию угла $\theta'(t)$ от его начального значения $\theta'_0$ до конечного $\theta'_\infty$. Располагая зависимостью $\theta'(t)$ (или $\Delta\overline{\nu}(t)/\Delta\overline{\nu}_0$), можем сравнить данные, полученные численными и экспериментальными методами. Но следует отметить, что наилучшего результата при применении ЯМР-спектроскопии достигают только в условиях приложения сильных внешних полей, когда искажение картины квадрупольных спектров, обусловленных наличием упругих сил, полностью подавляется внешними магнитным и электрическим полями. Поэтому необходимо развивать аналитические и вычислительные методы, позволяющие качественно верно и количественно точно описать релаксационные процессы в ЖК-ячейках, подверженных воздействию сравнительно слабых внешних полей. Теоретическое описание релаксационных процессов в ЖК-ячейках при разнообразных внешних условиях является нетривиальной задачей, решение которой и составляет цель настоящей работы. В данной работе приводятся гидродинамические уравнения, описывающие переориентацию директора и поля скоростей, результаты их численного решения и значения времен релаксации полей директора, скорости, компонент тензора напряжений и коэффициента сдвиговой вязкости к их равновесным значениям для ряда внешних воздействий на слой ЖК-фазы.

## 2. Основные гидродинамические уравнения и их решение

Состояние такой движущейся несжимаемой анизотропной системы как нематический ЖК, находящейся под влиянием внешних магнитного $\mathbf{B}$ и электрического $\mathbf{E}$ полей, определяется балансом всех возникающих в единице объема ЖК-ячейки моментов сил $\mathbf{T}_{\text{elast}} + \mathbf{T}_{\text{vis}} + \mathbf{T}_{\text{mag}} + \mathbf{T}_{\text{el}} = 0$ и аналогом уравнения Навье–Стокса для поля скорости $\mathbf{v}(t, \mathbf{r})$. В этом случае директор $\hat{\mathbf{n}}(t, \mathbf{r})$ в процессе переориентации остается в плоскости, образованной внешними полями $\mathbf{E}$ и $\mathbf{B}$, и, таким образом, можно с полной уверенностью считать, что все физические величины зависят только от координаты $z$, а выражение для директора принимает вид $\hat{\mathbf{n}} = \cos\theta(t, z)\hat{\mathbf{i}} + \sin\theta(t, z)\hat{\mathbf{k}}$ (рис. 1). В этом случае уравнение Навье–Стокса может быть записано в виде

$$\rho_m \partial_t v_i(t, z) = \partial_z \sigma_{zi}, \quad (i = x, z), \tag{1}$$

где $\partial_t = \partial/\partial t$, $\rho_m$ — плотность материала, $\mathbf{v} = v_x(t, z)\hat{\mathbf{i}} + v_z(t, z)\hat{\mathbf{k}}$ — скорость и $\sigma_{ij}(i, j = x, y, z)$ — компоненты тензора вязких напряжений несжимаемого нематического ЖК, который выражается через компоненты директора и градиента вектора скорости [3,4]. Момент силы, действующий на единицу объема ЖК и обусловленный магнитным полем $\mathbf{B}$, равен $\mathbf{T}_{\text{mag}} = \frac{\chi_a}{\mu_0}\hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{B}(\hat{\mathbf{n}} \times \mathbf{B}) = -\frac{\chi_a}{2\mu_0} B^2 \sin 2(\theta + \alpha)\hat{\mathbf{j}}$, где $\mu_0$ — магнитная постоянная, $\chi_a$ — магнитная анизотропия среды, $\alpha$ — угол между направлениями магнитного и электрического полей. Момент силы, обусловленный электрическим полем $\mathbf{E}(z)$, определяется выражением $\mathbf{T}_{\text{el}} = \epsilon_0\epsilon_a \hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{E}(\hat{\mathbf{n}} \times \mathbf{E}) = -\frac{\epsilon_0\epsilon_a}{2} E^2(z) \sin 2\theta\hat{\mathbf{j}}$, где $\epsilon_0$ — электрическая постоянная, $\epsilon_a$ — диэлектрическая анизотропия ЖК-фазы, а момент силы гидродинамической природы имеет вид [3,4] $\mathbf{T}_{\text{vis}} = \left[\gamma_1\theta_t + \frac{1}{2}(\gamma_1 + \gamma_2\cos 2\theta)u_z\right]\hat{\mathbf{j}}$, где $\gamma_1$ и $\gamma_2$ — коэффициенты вращательной вязкости нематического ЖК, $u_z \equiv \partial_z u(t, z) = \partial v_x(t, z)/\partial z$. Момент силы, обусловленный упругими силами Франка, может быть записан в виде [10] $\mathbf{T}_{\text{elast}} = \left[-\frac{1}{2}\mathscr{G}_\theta(\theta)\theta_z^2 - \mathscr{G}(\theta)\theta_{zz}\right]\hat{\mathbf{j}}$, где $\mathscr{G}(\theta) = (K_1\cos^2\theta + K_3\sin^2\theta)$, $\theta_z \equiv \partial\theta(t, z)/\partial z$, $\theta_{zz} = \partial^2\theta(t, z)/\partial z^2$, $K_1$ и $K_3$ — упругие постоянные Франка, соответствующие поперечному и продольному изгибам. Таким образом, баланс моментов, действующих на единицу объема ЖК-фазы, принимает вид

$$\gamma_1\theta_t = -\mathscr{A}(\theta)u_z + \frac{1}{2}\mathscr{G}_\theta(\theta)\theta_z^2 + \mathscr{G}(\theta)\theta_{zz} + \frac{\chi_a}{2\mu_0}B^2\sin 2(\theta + \alpha) + \frac{\epsilon_0\epsilon_a}{2}E^2(z)\sin 2\theta, \tag{2}$$

где $\mathscr{A}(\theta) = \frac{1}{2}(\gamma_1 + \gamma_2\cos 2\theta)$.

Эти уравнения должны быть дополнены выражением, описывающим закон сохранения зарядов $\nabla \cdot \mathbf{D} = 0$, где $\mathbf{D}(z)$ — поле вектора электрической индукции, имеющей в нашем случае только $z$-компоненту, связанную с электрическим полем соотношением

$$D_z = \left[\epsilon_0\epsilon_\perp + \epsilon_0\epsilon_a\sin^2(\theta(t, z))\right]E(z). \tag{3}$$

Здесь $\epsilon_\parallel$ и $\epsilon_\perp$ являются диэлектрическими постоянными, измеренными вдоль и поперек направления директора $\hat{\mathbf{n}}$ соответственно. Все это позволяет переписать уравнение сохранения заряда в виде

$$\partial\left[\left(\epsilon_0\epsilon_\perp + \epsilon_0\epsilon_a\sin^2\theta(t, z)\right)E(z)\right]/\partial z = 0, \tag{4}$$

а выражение для электрического поля принимает вид

$$U = \int_0^d E(z)dz, \tag{5}$$

где $U$ — напряжение, приложенное к ячейке, а $d$ — ее толщина.

Условие несжимаемости нематика $\nabla \cdot \mathbf{v} = 0$ вместе с условием отсутствия скольжения на границах ЖК-ячейки $\mathbf{v}|_{z=0,d} = 0$ приводит к тому, что в нашей плоской

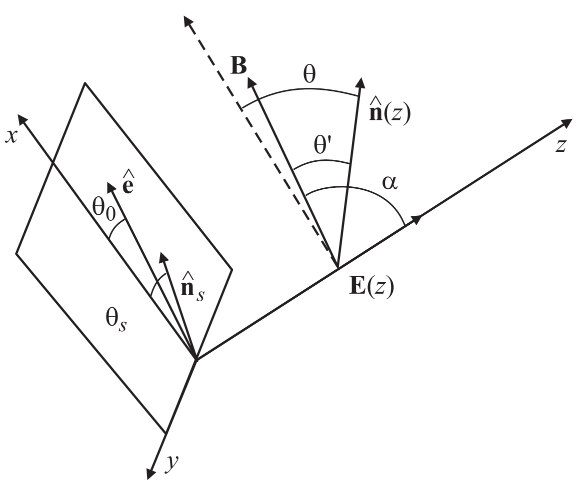


**Рис. 1.** Система координат. Ось $z$ совпадает с направлением электрического поля $\mathbf{E}$ и перпендикулярна обоим электродам. Направления электрического поля $\mathbf{E}$ и магнитного поля $\mathbf{B}$ определяют плоскость, в которой лежит вектор $\hat{\mathbf{n}}$, образующий угол $\theta$ с осью $x$. Векторы $\mathbf{B}$ и $\mathbf{E}$ расположены под углом $\alpha$ друг к другу, а векторы $\hat{\mathbf{n}}$ и $\mathbf{B}$ — под углом $\theta'$.

задаче присутствует только одна компонента вектора скорости $\mathbf{v} = \upsilon_x \mathbf{i} + \upsilon_z \mathbf{k}$, направленная вдоль вектора $\mathbf{i}$. Таким образом, в уравнении (1) имеет место только касательное напряжение $\sigma_{zx}$, выражающееся в терминах коэффициентов Лесли $\alpha_i (i = 1, \ldots, 6)$ в виде

$$\sigma_{zx} = h(\theta)u_z - \mathscr{A}(\theta)\theta_t, \tag{6}$$

где $u_z = \partial \upsilon_x(z)/\partial z$, $h(\theta) = \alpha_1 \sin^2\theta \cos^2\theta - \frac{1}{2}\mathscr{A}(\theta) + \frac{1}{2}\alpha_4 + g(\theta)$ и $g(\theta) = \frac{1}{2}(\alpha_5 \sin^2\theta + \alpha_6 \cos^2\theta)$ соответственно. С учетом всего изложенного выше уравнение (1) принимает вид

$$\rho_m \partial_t u(t, z) = \partial_z \sigma_{zx}. \tag{7}$$

С целью изучения эволюции угла $\theta(t, z)$ к его равновесному значению $\theta_{\mathrm{eq}}(z)$ и эволюции поля скорости $u(t, z)$, вызванного переориентацией директора $\hat{\mathbf{n}}$ к его равновесному значению, рассмотрим безразмерный аналог уравнений (1)–(5), принимающий вид

$$\theta_\tau = -\overline{\mathscr{A}}(\theta)u_z + \delta_1 \left[\frac{1}{2}\overline{\mathscr{G}}_\theta(\theta)\theta_z^2 + \overline{\mathscr{G}}(\theta)\theta_{zz}\right] + \left(E^2(z)/2\right)\sin 2\theta + \delta_2 \sin 2(\theta + \alpha), \tag{8}$$

$$\delta_3 \partial_\tau u(\tau, z) = \partial_z \overline{\sigma}_{zx}, \tag{9}$$

$$\partial\left[\left(\epsilon_\perp/\epsilon_a + \sin^2\theta(\tau, z)\right)E(z)\right]/\partial z = 0, \tag{10}$$

$$1 = \int_0^1 E(z)dz, \tag{11}$$

где $\overline{\mathscr{A}}(\theta) = \mathscr{A}(\theta)/\gamma_1$, $\overline{\mathscr{G}}(\theta) = \mathscr{G}(\theta)/K_1$, $\overline{\sigma}_{zx} = [h(\theta)u_z - \mathscr{A}(\theta)\theta_\tau]/\gamma_1$. Здесь $\tau = (\epsilon_a\epsilon_0 E^2/\gamma_1)t$ — безразмерное время, $\overline{z} = z/d$ — безразмерное расстояние от нижнего электрода, $\overline{E}(z) = E(z)/E$, $\delta_1 = K_1/(\epsilon_0\epsilon_a E^2 d^2)$, $\delta_2 = (\chi_a B^2)/(2\epsilon_0\epsilon_a E^2\mu_0)$, $\delta_3 = \rho_m\epsilon_0\epsilon_z E^2 d^2/\gamma_1^2$ являются параметрами системы, $E = U/d$. Черта на безразмерными переменными в уравнениях (8)–(11) впоследствии опущена.

Рассмотрим ЖК-пленку между двумя электродами, когда директор $\hat{\mathbf{n}}$ слабо взаимодействует с ограничивающими поверхностями. Энергия этого взаимодействия будет рассматриваться в форме Рапини [10] $W = \frac{1}{2}A\sin^2(\theta_s - \theta_0)$, где $A$ — плотность энергии сцепления, $\theta_s$ и $\theta_0$ — углы, соответствующие ориентации директора на твердой поверхности $\hat{\mathbf{n}}_s$ и оси преимущественного (легкого) ориентирования $\hat{\mathbf{e}}$. Баланс моментов на ограничивающих поверхностях приводит к условиям, которым должна в данном приближении удовлетворять ориентация директора на твердой поверхности

$$\overline{\mathscr{G}}(\theta)(\partial\theta(z)/\partial z)_{z=0} = \frac{Ad}{2K_1}\sin 2\Delta\theta^-,$$

$$\overline{\mathscr{G}}(\theta)(\partial\theta(z)/\partial z)_{z=1} = -\frac{Ad}{2K_1}\sin 2\Delta\theta^+, \tag{12}$$

где $\Delta\theta^\pm = \theta_s^\pm - \theta_0^\pm$, причем $\theta_s^\pm$ и $\theta_0^\pm$ — углы, под которыми директор ориентирован у поверхностей $z = 0$ и 1 соответственно. Начальная ориентация директора распределена параллельно обеим поверхностям $\theta(\tau = 0, z) = 0$ а затем директор релаксирует к своему равновесному значению $\theta_{\mathrm{eq}}(z)$. Граничные условия для поля скорости имеют вид

$$u(z)_{z=0} \equiv \upsilon_x(z)_{z=0} = 0, \quad u(z)_{z=1} \equiv \upsilon_x(z)_{z=1} = 0. \tag{13}$$

Процесс переориентации директора в ЖК-пленке между двумя твердыми поверхностями, когда режим релаксации определяется вязкими, упругими, магнитными и электрическими силами, и с учетом влияния гидродинамических эффектов может быть изучен с помощью решения системы нелинейных дифференциальных уравнений (8)–(11) с начальным условием $\theta(\tau = 0, z) = 0$ и граничными условиями как для угла $\theta(\tau, z)$ (см. (12)), так и для поля скорости $u(\tau, z)$ (см. (13)).

Для нематика 4-*n*-пентил-4′-цианобифелин (5ЦБ) при температуре $T = 300\,\mathrm{K}$ и плотности $10^3\,\mathrm{kg/m^3}$ вычисленные методом молекулярной динамики значения упругих постоянных составляют $K_1 = 9.5\,\mathrm{pN}$ и $K_3 = 13.8\,\mathrm{pN}$ [11], экспериментальные данные для $A$, полученные различными экспериментальными методами [5], имеют порядок $\sim 10^{-7}\,\mathrm{J/m^2}$. В дальнейшем используем значения диэлектрических постоянных $\epsilon_\parallel = 18$ и $\epsilon_\perp = 8$ [12], а также значения вязкостей $\gamma_1 \sim 0.072\,\mathrm{Pa\cdot s}$ и $\gamma_2 \sim -0.079\,\mathrm{Pa\cdot s}$ [5] при температуре $T = 300\,\mathrm{K}$. В этих условиях значения шести коэффициентов Лесли были оценены (в $\mathrm{Pa\cdot s}$) [13] как $\alpha_1 \sim -0.0066$, $\alpha_2 \sim -0.075$, $\alpha_3 \sim -0.035$, $\alpha_4 \sim 0.072$, $\alpha_5 \sim 0.048$ и $\alpha_6 \sim -0.03$ соответственно. Значение электрического напряжения в пленке ЖК толщиной $56.1\,\mu\mathrm{m}$ было зафиксировано равным 50 V.

В случае плоской геометрии, когда углы $\theta_s$ и $\theta_0$ близки к нулю, $\Delta\theta$ достаточно мал, $\Delta\theta^\pm \sim 1{-}3^\circ$ и значения $\sin 2\Delta\theta^\pm \sim 2\Delta\theta^\pm$, поэтому значения комбинации величин $Ad\Delta\theta^\pm/K_3$ находятся между 0.03 и $4 \cdot 10^{-4}$. В случае гомеотропной ориентации директора на обоих электродах угол $\theta_s$ близок к $\frac{\pi}{2}$, в то время как угол $\theta_0$ близок к нулю, и $2\Delta\theta \sim \pi$, так что значения $(Ad/2K_3)\sin 2\Delta\theta$ изменяются в тех же пределах. С учетом изложенного три безразмерных параметра равны $\delta_1 \sim 0.53$, $\delta_2 \sim 0.285$ и $\delta_3 \sim 10^{-5}$. Поскольку $\delta_3 \ll 1$, уравнение (9) принимает вид

$$\overline{\sigma}_{zx} = [h(\theta)u_z - \mathscr{A}(\theta)\theta_\tau]/\gamma_1 = -C(\tau), \tag{14}$$

где $C(\tau)$ — функция, которая не зависит от $z$ и определяется граничными условиями. Релаксация директора $\hat{\mathbf{n}}$ к его равновесной ориентации $\hat{\mathbf{n}}_{\mathrm{eq}}$, которая описывается углом $\theta(\tau, z)$, из начального состояния $\theta(0, z) = 0$ к равновесному углу $\theta_{\mathrm{eq}}(z) = \pi/2$, т. е. в конечное состояние с директором вдоль направления электрического поля $\mathbf{E}$, в ЖК-пленке между двумя электродами в различные моменты времени (от $\tau = 0$ (кривая *1* на рис. 2) до 15 (кривая *10* на рис. 2)) была исследована численно методом релаксации [14] при значении параметра $\frac{Ad}{2K_1}\sin(2\Delta\theta^\pm) = 0.033$. При этом критерий релаксации

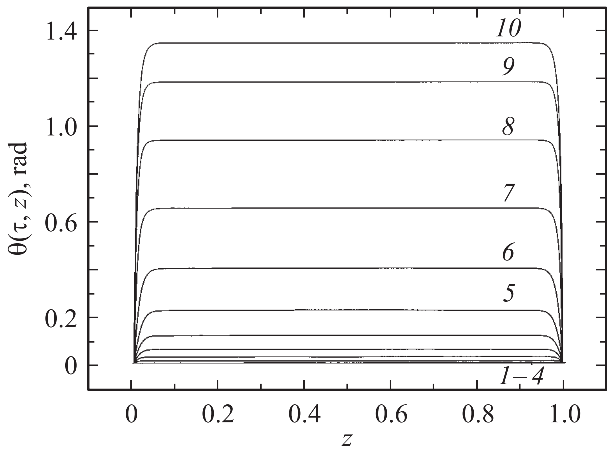


**Рис. 2.** Зависимость распределения угла $\theta(\tau, z)$ по ЖК-образцу в разные моменты времени $\tau$ ($\tau = (\epsilon_a \epsilon_0 E^2/\gamma_1)t$ — безразмерное время, $z$ — безразмерное расстояние от нижней, ограничивающей ЖК-ячейку поверхности), рассчитанная с помощью уравнений (8)–(11) для случая гомеотропной ориентации директора на обеих поверхностях электродов ($(Ad/2K_1)\sin 2(\Delta\theta^{\pm}) = 0.033$), в течение первых 15 единиц времени с шагом $\Delta\tau_R = 1.5$ при $\alpha = \frac{\pi}{2}$.

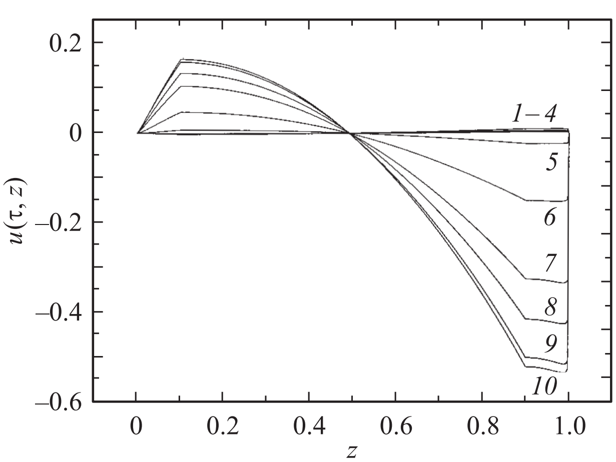


**Рис. 3.** Зависимость поля безразмерной скорости $u(\tau, z)$ ($u(\tau, z) = (\gamma_1/\epsilon_0\epsilon_a E^2 d)u(t, z)$) в разные моменты времени $\tau$, рассчитанная с помощью уравнений (8)–(11) для случая гомеотропной ориентации директора на обеих поверхностях электродов ($(Ad/2K_1)\sin 2(\Delta\theta^{\pm}) = 0.033$), в течение первых 15 единиц времени с шагом $\Delta\tau_R = 1.5$ при $\alpha = \frac{\pi}{2}$.

поля директора к его равновесному значению был выбран в виде $\varepsilon = |(\theta(\tau_R) - \theta_{eq})/\theta_{eq}| = 10^{-4}$. Результаты расчетов эволюции поля скоростей $u(\tau, z)$ и электрического поля в течение первых 15 единиц безразмерного времени $\tau$ представлены на рис. 3 и 4 соответственно, в то время как рис. 5 иллюстрирует заключительную фазу эволюции поля скоростей к нулю в течение 30 единиц безразмерного времени $\tau$. Результаты вычислений показали, что при больших значениях электрического ($\sim 50\,\mathrm{eV}$) и магнитного ($\sim 7\,\mathrm{T}$) полей учет гидроди-

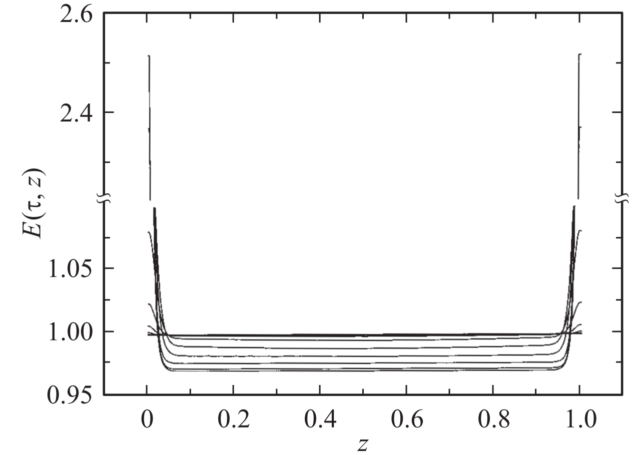


**Рис. 4.** Эволюция распределения электрического поля $E(\tau, z)$ в течение первых 15 единиц времени при $\alpha = \frac{\pi}{2}$.

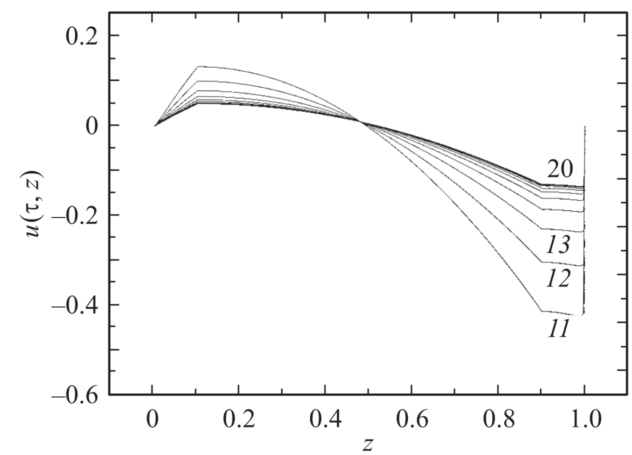


**Рис. 5.** То же, что на рис. 3 в течение следующих 15 единиц времени.

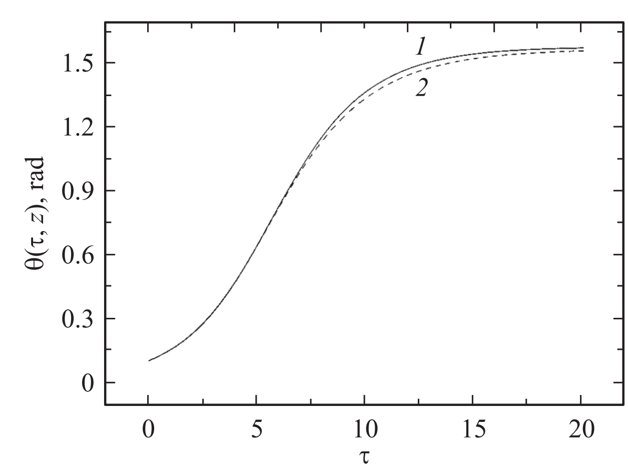


**Рис. 6.** Релаксация угла $\theta(\tau, z)$ ($\tau = (\epsilon_0\epsilon_0 E^2/\gamma_1)t$) к равновесному значению $\theta_{eq} = \frac{\pi}{2}$, рассчитанная как с учетом (*1*), так и без учета (*2*) гидродинамического потока $u(\tau, z)$ при $\alpha = \frac{\pi}{2}$.

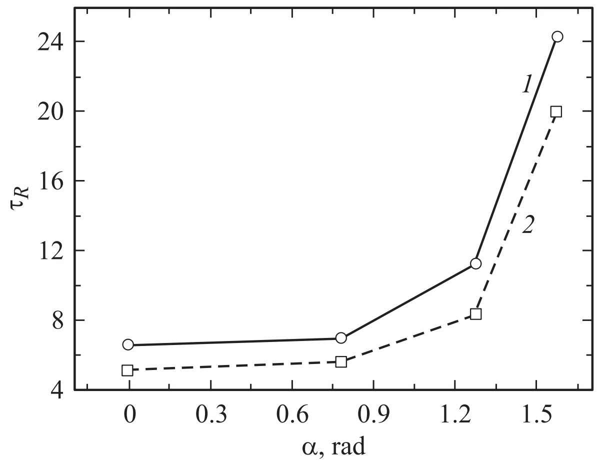


**Рис. 7.** Влияние величины $W$ энергии поверхностного сцепления молекул ЖК-фазы с электродами и угла $\alpha$ на время релаксации $\tau_{\mathrm{R}}$. *1* — $\theta_s = 1^\circ$, $\theta_0 = 0.5^\circ$; *2* — $\theta_s = 5^\circ$, $\theta_0 = 2.5^\circ$.

намических течений, индуцированных переориентацией поля директора, практически не влияет на величину и характер релаксации как поля скорости, так и поля деформаций директора (рис. 6). Значительно большее влияние на величину времени релаксации $\tau_{\mathrm{R}}$ директора к его равновесной ориентации оказывает величина угла $\Delta\theta^{\pm}$. Так, при изменении величины угла $\Delta\theta^{\pm}$ на $2^\circ$ от величины $\Delta\theta^{\pm} = \theta_s^{\pm} - \theta_0^{\pm} = 5^\circ - 2.5^\circ = 2.5^\circ$ до величины $\Delta\theta^{\pm} = 1^\circ - 0.5^\circ = 0.5^\circ$, в 5 раз меньше, время релаксации $\tau_{\mathrm{R}}$ увеличивается при всех прочих равных условиях практически на 20%. Еще большее влияние на величину времени релаксации оказывает величина угла $\alpha$ между направлениями магнитного и электрического полей (см. также рис. 7). По мере приближения $\alpha$ к $\pi/2$ время релаксации $\tau_{\mathrm{R}}$ поля директора к равновесному значению увеличивается более чем в 3 раза. Так, величина $\tau_{\mathrm{R}}(\alpha = \pi/2) \sim 20$, что соответствует $t_{\mathrm{R}} \sim 18$ ms. Релаксационный процесс поля скоростей $u(\tau, z)$ в ЖК-пленке между двумя электродами характеризуется осцилляционным поведением $u(\tau, z)$ как с изменением времени $\tau$, так и с изменением пространственной переменной $z$ (рис. 3 и 5). Но по мере приближения к равновесному распределению поля скоростей амплитуда осцилляций убывает, принимая более гладкий вид, прежде чем достичь нулевого значения. При этом максимальная величина размерной скорости $v_x(t, z) = (\epsilon_0 \epsilon_a E^2 d/\gamma_1) u(\tau, z)$ в ЖК-пленке между двумя электродами может достигать величины $\sim 30$ mm/s. Следует отметить, что компоненты тензора вязких напряжений $\overline{\sigma}_{ij}$ могут быть получены прямо с помощью функции диссипации Рэлея $\mathscr{D}$ [15]. Так, сдвиговая компонента тензора вязких напряжений $\overline{\sigma}_{zx}$ связана с $\mathscr{D}$ соотношением

$$\overline{\sigma}_{zx}(\tau) = \partial \mathscr{D}/\partial u_z, \tag{15}$$

где

$$2\mathscr{D} = \overline{\sigma}_{zx} u_z + \theta_\tau \left[\overline{\sigma}_{zx} - \overline{\sigma}_{xz}\right]. \tag{16}$$

Уравнение (16) позволяет записать компоненту $\overline{\sigma}_{xz}(\tau, z)$ в виде

$$\overline{\sigma}_{xz}(\tau, z) = \overline{\sigma}_{zx}(\tau) - \theta_\tau + \overline{\mathscr{A}}(\theta) u_z. \tag{17}$$

С учетом выражений (9) и (14) уравнение (17) преобразуется к виду

$$\overline{\sigma}_{xz}(\tau, z) = C(\tau) - \frac{1}{2} E^2(z) \sin 2\theta - \delta_2 \sin 2(\alpha + \theta)$$
$$- \delta_1 \left[\frac{1}{2} \mathscr{G}_\theta(\theta) \theta_z^2 + \overline{\mathscr{G}}(\theta) \theta_{zz}\right]. \tag{18}$$

Важно подчеркнуть, что линейный баланс моментов для $i = z$ (см. (1)) принимает вид [15]

$$P_z + \frac{\partial \mathscr{D}(\tau, z)}{\partial \theta_\tau} \theta_z = 0, \tag{19}$$

где $P_z = \partial P(\tau, z)/\partial z$, а вязкий вклад в произвольное давление $\overline{P}$ преобразуется к форме

$$P(\tau, z) = -\int_0^z (\theta_\tau + \overline{A}(\theta) u_z) dz. \tag{20}$$

Эти альтернативные формы, данные уравнениями (19) и (20), позволяют нам получить остальные компоненты тензора напряжений $\overline{\sigma}_{zz}(\tau, z)$ и $\overline{\sigma}_{xx}(\tau, z)$ в виде

$$\overline{\sigma}_{zz}(\tau, z) = -E^2(z)(\epsilon_\perp/\epsilon_a + \sin^2\theta), \tag{21}$$

$$\overline{\sigma}_{xx}(\tau, z) = \overline{\sigma}_{zz}(\tau) + \delta_1 \overline{\mathscr{G}}(\theta) \theta_z^2. \tag{22}$$

Численные методы позволяют рассчитать характер релаксации компонент тензора напряжений $\overline{\sigma}_{zx}(\tau)$, $\overline{\sigma}_{xz}(\tau, z)$, $\overline{\sigma}_{zz}(\tau, z)$ и $\overline{\sigma}_{xx}(\tau, z)$ в ЖК-ячейке между двумя электродами как с учетом, так и без учета гидродинамического течения, индуцированного переориентацией поля директора к его равновесному положению.

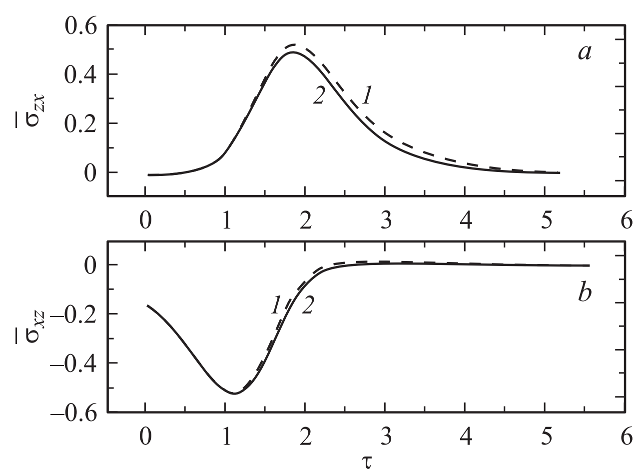


**Рис. 8.** Релаксация безразмерных сдвиговых компонент тензора напряжений $\overline{\sigma}_{zx}(\tau)$ (*a*) и $\overline{\sigma}_{xz}(\tau, z)$ (*b*) к равновесным значениям, рассчитанная с помощью уравнений (14) и (18) без учета (*1*) и с учетом (*2*) гидродинамического течения при $\alpha = 0$ и $z = 0.1$.

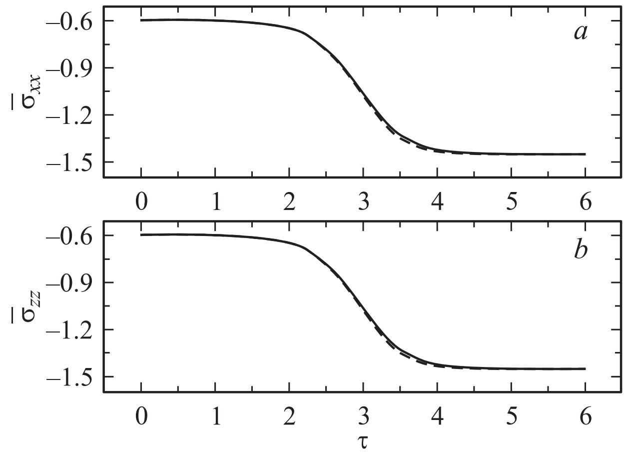


**Рис. 9.** То же, что на рис. 8, для релаксации нормальных компонент тензора напряжений $\overline{\sigma}_{xx}(\tau, z)$ $(a)$ и $\overline{\sigma}_{zz}(\tau, z)$ $(b)$, при $z = 0.1$.

На рис. 8 представлен процесс релаксации сдвиговых компонент $\overline{\sigma}_{zx}(\tau)$ и $\overline{\sigma}_{xz}(\tau, z)$, а на рис. 9 — нормальных компонент $\overline{\sigma}_{zz}(\tau, z)$ и $\overline{\sigma}_{xx}(\tau, z)$ в течение первых 5 единиц безразмерного времени $\tau_{\mathrm{R}}$, что соответствует $\sim 4.5\,\mathrm{ms}$. Вычисления размерных величин компонент $\sigma_{ii} = (\epsilon_a\epsilon_0 E^2)\overline{\sigma}_{ii}$ $(i = x, z)$ показывают, что под влиянием внешних сил величина сдвиговой компоненты тензора $\overline{\sigma}_{zx}$ достигает абсолютного значения 0.04 Pa в течение начальной стадии релаксационного процесса ($\Delta\tau_{zx} \sim 2$ (1.8 ms), рис. 8, $a$), а затем быстро убывает до нуля. Из рис. 8, $a$ и $b$ видно, что безразмерное сдвиговое напряжение $\overline{\sigma}_{xz}(\tau, z)$ релаксирует к нулю в 2 раза быстрее, чем компонента $\overline{\sigma}_{zx}(\tau)$, в то время как обе нормальные компоненты тензора напряжений $\overline{\sigma}_{xx}$ и $\overline{\sigma}_{zz}$ релаксирует к значению 1.4 (рис. 9, $a$ и $b$) практически с одним и тем же временем релаксации $\Delta\tau_{xx} \sim \Delta\tau_{zz} \sim 5$ ($\sim 4.5\,\mathrm{ms}$). Наши вычисления также показывают, что учет гидродинамического течения $u(\tau, z)$ при больших значениях электрического поля слабо влияет на характер релаксации как поля деформации директора, так и компонент тензора напряжений. В то же время величина угла $\alpha$ оказывает существенное влияние на характер и величину релаксации компонент тензора $\overline{\sigma}_{zx}$, $\overline{\sigma}_{xz}$, $\overline{\sigma}_{xx}$ и $\overline{\sigma}_{zz}$ (рис. 10 и 11). Так, с ростом величины угла $\alpha$ от 0 до $44.7^\circ$ время релаксации $\Delta\tau_{zx}$ компоненты $\overline{\sigma}_{zx}$ увеличивается примерно в 3 раза от $\Delta\tau_{zx}(0) \sim 6$ ($\sim 5.4\,\mathrm{ms}$) до $\Delta\tau_{zx}(44.7^\circ) \sim 18$ ($\sim 16.2\,\mathrm{ms}$), а для компонетны $\overline{\sigma}_{xz}$ найден рост значений $\Delta\tau_{xz}$ в 4 раза от $\Delta\tau_{xz}(0) \sim 3$ ($\sim 2.7\,\mathrm{ms}$) до $\Delta\tau_{xz}(44.7^\circ) \sim 12$ ($\sim 11\,\mathrm{ms}$). Релаксации компонент $\overline{\sigma}_{xx}$ и $\overline{\sigma}_{zz}$ характеризуются осцилляционным поведением $\overline{\sigma}_{ii}(\alpha)$ $(i = x, z)$ с ростом угла $\alpha$ (рис. 11, $a$ и $b$). Действительно, с ростом величины угла $\alpha$ с 0 до $44.7^\circ$ значения компонент тензора напряжений $\overline{\sigma}_{zz}$ и $\overline{\sigma}_{xx}$ релаксируют к равновесному значению практически с одним и тем же временем $\Delta\tau_{ii}(\alpha) \sim 5$ (4.5 ms), в то время как с ростом величины угла $\alpha$ до $\frac{\pi}{2}$ значения безразмерных компонент тензора напряжений $\overline{\sigma}_{ii}(\pi/2)$ $(i = x, z)$ релаксируют примерно в 4 раза медленнее $\overline{\sigma}_{ii}(\pi/2) \sim 20$ (18 ms). Отметим, что безразмерная нормальная компонента тензора напряжений $\overline{\sigma}_{zz}$ может изменить знак в соответствии с уравнением (21), когда директор $\hat{\mathbf{n}}$ сориентирован под углом $\theta_m = \arcsin\left(\sqrt{-\epsilon_\perp/\epsilon_a}\right)$ относительно электродов (рис. 1). Располагая значениями поля скоростей $u(\tau, z)$ и сдвиговой компоненты тензора напряжений $\overline{\sigma}_{zx}(\tau) = \mathcal{R}(\theta)u_z - \mathcal{A}(\theta)\theta_\tau$, можно рассчитать коэффициент сдвиговой вязкости $\eta_s \equiv \eta_{zx}$ с помощью соотношения $\overline{\sigma}_{zx}(\tau, z) = \overline{\eta}_s \partial u(\tau, z)/\partial z = \overline{\eta}_s u_z(\tau, z)$ или

$$\overline{\eta}_s = \mathcal{R}(\theta) - 2(\overline{\mathcal{A}}(\theta)\theta_\tau/u_z). \qquad (23)$$

Релаксация сдвиговой вязкости $\overline{\eta}_s = \eta_s/\gamma_1$ к ее равновесному значению в ЖК-пленке, образованной молекулами 5ЦБ, под действием как электрического ($U = 50\,\mathrm{V}$), так и магнитного ($B = 7\,\mathrm{T}$) поля для двух различных расстояний от нижнего электрода $z/d = 0.1$

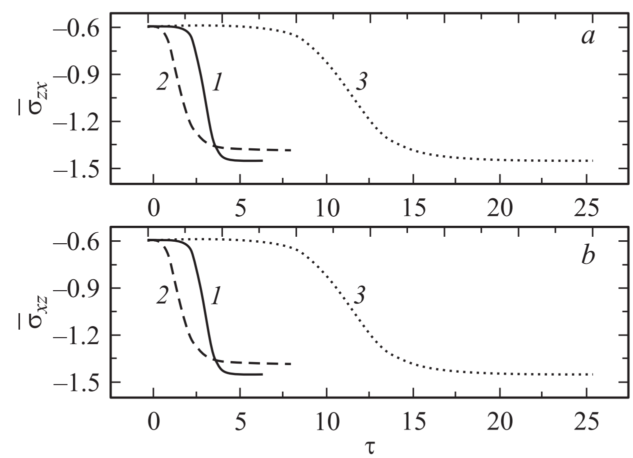


**Рис. 10.** Зависимости процесса релаксации безразмерных сдвиговых компонент тензора напряжения $\overline{\sigma}_{zx}$ $(a)$ и $\overline{\sigma}_{xz}$ $(b)$ от угла $\alpha$. $\alpha$,°: *1* — 0, *2* — 44.7, *3* — 90.

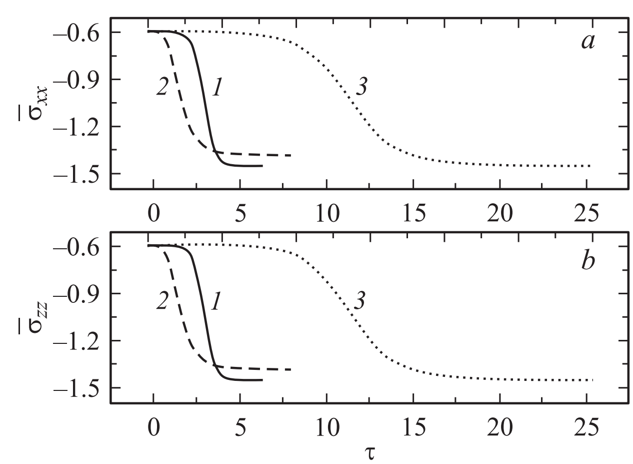


**Рис. 11.** То же, что на рис. 10, для нормальных компонент тензора напряжений $\overline{\sigma}_{xx}(\alpha)$ $(a)$ и $\overline{\sigma}_{zz}(\alpha)$ $(b)$.

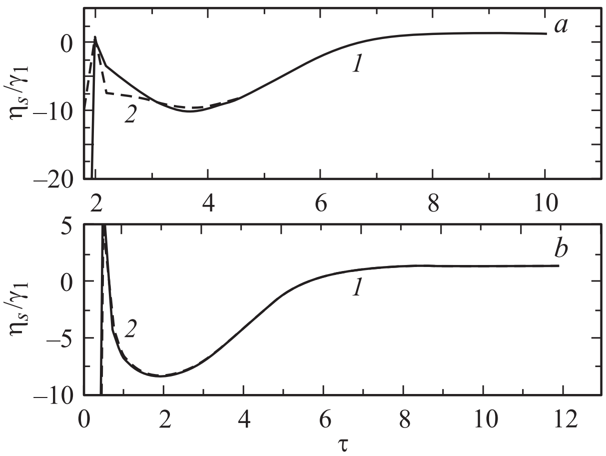


**Рис. 12.** Релаксация безразмерной сдвиговой вязкости $\overline{\eta}_s(\tau, z) = \eta_s/\gamma_1$ к равновесному значению $\overline{\eta}_s(eq)$ при $z = 05$ (*1*) и 0.1 (*2*) для случаев $\alpha = 0$ (*a*) и 44.7° (*b*).

(ближе к нижнему электроду) и 0.5 (в середине ЖК-пленки) представлена на рис. 12, *a* и *b*. Эволюция коэффициента сдвиговой вязкости на начальной стадии $\Delta\tau \sim 2$ ($\sim 2$ ms) характеризуется осцилляционным поведением с изменением $\tau$. Тем не менее сдвиговая вязкость $\eta_s(\tau)$ релаксирует к значению $\lim_{\tau\to\Delta\tau_s} \eta_s(\tau) \to \eta_s(\mathrm{eq}) \sim 1.4\gamma_1$ по всей толщине пленки со временем $\Delta\tau_s \sim 9$ ($\sim 8$ ms).

## 3. Обсуждение полученных результатов и выводы

Как отмечено во Введении, методы ЯМР-спектроскопии позволяют непосредственно получить информацию о характере релаксации отношения квадрупольного расщепления спектра $\Delta\overline{\nu}(t)/\Delta\overline{\nu}_0 = P_2(\theta'(t))$ к его равновесному значению. В начале эксперимента поле директора в нематической ячейке, образованной полярными молекулами 5ЦБ, ориентируется вдоль направления магнитного поля ($\sim 7$ T) и характеризуется квадрупольным расщеплением спектра $\Delta\overline{\nu}_0$ и углом $\theta'_0 = 0°$. Затем включается сильное электрическое поле ($\sim 50$ V), направленное под углом $\alpha = 44.7°$ к направлению магнитного поля, что приводит к переориентации поля директора, характеризующейся изменением квадрупольного расщепления спектра $\Delta\overline{\nu}(t)$. По истечении времени релаксации ($\sim 7$ ms) поле директора ориентируется под углом $\theta'_\infty(\pi/4) \sim 29.8°$ относительно направления магнитного поля. Эти экспериментально полученные данные [5,6] для $\Delta\overline{\nu}(t)/\Delta\overline{\nu}_0$ представлены на рис. 13 точками. Эволюция величины $\Delta\overline{\nu}(t)/\Delta\overline{\nu}_0$, вычисленная с учетом только электрического и магнитного полей, показана на рис. 13 кривой *1*. Здесь угол $\theta'(t)$ найден из выражения $\tan(\theta'(t) - \theta'_\infty(\alpha)) = \tan(\theta'_0 - \theta'_\infty(\alpha)) \exp(-t/\tau_{on})$, где $\theta'_\infty(\alpha)$ — предельное значение $\theta'(t)$ при $t \to \infty$, $\tau_{on}$ — время релаксации, а $\theta'_0$ — начальное значение угла $\theta'(t)$. Время релаксации дается выражением $\tau_{on} = \gamma_1/(\Delta\epsilon_0\epsilon_a E^2)$, где $\Delta = \sqrt{1 + 2\rho\cos 2\alpha + \rho^2}$, $\rho = \mu_0\epsilon_0 \frac{\epsilon_a}{\chi_a} (E/B)^2$ и $\cos\theta'_\infty(\alpha) = (1 + \rho\cos 2\alpha)/\Delta$. Результаты расчета $\theta'(t)$ показывают, что при включении электрического поля директор $\hat{\mathbf{n}}$ начинает вращаться в плоскости векторов $\mathbf{B}$ и $\mathbf{E}$, направленных под углом 44.7° друг к другу, от начального положения $\theta'_0 = 0$ до достижения равновесного положения, характеризующегося углом $\theta'_\infty(\alpha \sim \pi/4) = 29.8°$. Это положение достигается спустя $t_{\mathrm{R}} \sim 7$ ms. Результаты расчета величины $\Delta\overline{\nu}(t)/\Delta\overline{\nu}_0 = P_2(\theta'(t))$ с помощью угла $\theta = \pi/2 - \alpha + \theta'$, полученного как без учета, так и с учетом гидродинамического течения, представлены на рис. 13 кривыми *2* и *3* соответственно. В этом случае равновесное значение угла $\theta'_\infty(\alpha \sim \pi/4) = 28.8°$, что на 1° меньше значения угла, рассчитанного с учетом лишь магнитного и электрического полей, а гидродинамический вклад $\mathbf{T}_{\mathrm{vis}} = \gamma_1\hat{\mathbf{n}} \cdot \partial\hat{\mathbf{n}}/\partial t$ обусловлен лишь вращением директора. Таким образом, все остальные силы лишь немного корректируют равновесное положение директора, в то время как главный вклад вносят магнитное и электрическое поля. Учитывая тот факт, что в реальных ЖК-пленках электрическое поле на порядок величины меньше представленного здесь, полная картина эволюции поля директора и скоростей, а также компонент тензора напряжений может быть получена только теоретически, посредством решения нелинейных дифференциальных уравнений, учитывающих баланс моментов, и аналога уравнения Навье–Стокса для нематического ЖК. Мы полагаем, что данная работа освещает проблему теоретического и экспериментального описания процессов переориентации поля директора в ЖК-ячейках.

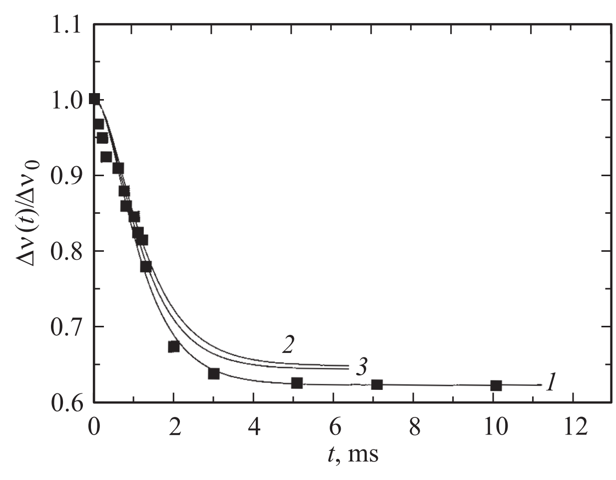


**Рис. 13.** Зависимость величины $\Delta\overline{\nu}(t)/\Delta\overline{\nu}_0$ от времени в процессе релаксации, рассчитанная с учетом только электрического и магнитного полей (*1*), а также с помощью уравнений (8)–(11) как без учета (*2*), так и с учетом (*3*) гидродинамического потока. Точки — экспериментальные данные, полученные с помощью ЯМР-спектроскопии для 5ЦБ при температуре 295 K и $\alpha = 44.7°$.

## Список литературы

[1] G.P. Crawford, S. Zumer. Liquid crystals in complex geometries formed by polymers and porous networks. Taylor and Francies, London (1996). P. 149.
[2] T. Bellini, L. Radzihovsky, J. Toner, N.A. Clark. Science **294**, 1074 (2001).
[3] J.L. Ericksen. Arch. Ration. Mech. Anal. **4**, 231 (1960).
[4] F.M. Leslie. Arch. Ration. Mech. Anal. **28**, 265 (1968).
[5] G.R. Luckhurst, T. Miyamoto, A. Sugimura, T. Takashiro, B.A. Timimi. J. Chem. Phys. **114**, 10 493 (2001).
[6] G.R. Luckhurst, T. Miyamoto, A. Sugimura, B.A. Timimi, H. Zimmermann. J. Chem. Phys. **121**, 1928 (2004).
[7] A. Buka, L. Kramer. Pattern formation in liquid crystals. Springer, Berlin (1995). 399 p.
[8] A.F. Martins, P. Esnault, F. Volino. Phys. Rev. Lett. **57**, 1745 (1986).
[9] G. Demeter, D.O. Krimer, L. Kramer. Phys. Rev. B **72**, 051712 (2005).
[10] P.G. de Gennes, J. Prost. The physics of liquid crystals. Oxford University Press, Oxford (1995). 349 p.
[11] A.V. Zakharov, A. Maliniak. Euro. Phys. J. E **4**, 85 (2001).
[12] A.V. Zakharov, A. Maliniak. Euro. Phys. J. E **4**, 435 (2001).
[13] A.G. Chmielewski. Mol. Cryst. Liq. Cryst. **132**, 339 (1986).
[14] И.С. Березин, Н.Р. Жидков. Методы вычислений. Физматгиз, М. (1964). 464 с.
[15] I.W. Stewart. The static and dynamic continuum theory of liquid crystals. Taylor and Francis, London (2004). 345 p.