14,15

Особенности релаксации тензора напряжения в микроскопическом объеме нематической фазы под действием сильного электрического поля

© *А.В. Захаров*

Институт проблем машиноведения РАН,
Санкт-Петербург, Россия

E-mail: alexandre.zakharov@yahoo.ca

(Поступила в Редакцию 30 мая 2017 г.)

Предложено численное исследование новых режимов переориентации поля директора $\hat{\mathbf{n}}$, скорости $\mathbf{v}$ и компонент тензора напряжения σ_{ij} $(ij = x, y, z)$ нематического жидкого кристалла (ЖК), инкапсулированного в прямоугольный канал, под действием сильного электрического поля $\mathbf{E}$, направленного под углом α $(\sim \frac{\pi}{2})$ к горизонтальным ограничивающим поверхностям ЖК-канала. Численные расчеты, выполненные в рамках нелинейного обобщения классической теории Эриксена–Лесли, показали, что при определенных соотношениях моментов и импульсов, действующих на единицу объема ЖК-фазы, и в случае $E \gg E_{\rm th}$, в процессе переориентации $\hat{\mathbf{n}}$ могут возникнуть переходные периодические структуры, если соответствующая мода искажения обладает наибыстрейшим откликом и, таким образом, подавляет все остальные моды. Возникающие при этом вращающиеся домены способствуют уменьшению скорости диссипации энергии и тем самым создают более выгодные, по сравнению с однородным поворотом, режимы переориентации поля директора.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант № 16-02-00041а).

DOI: 10.21883/FTT.2018.02.45400.177

1. Введение

В последнее время все чаще методы микро- и нанофлуидистики находят применение при исследовании процессов транспортировки и сортировки нанолитровых объемов жидкокристаллических (ЖК) материалов в разветвленных каналах и капиллярах (lab-on-chip-system) под действием внешнего электрического поля (электрокинетика) [1,2]. С другой стороны, ЖК-материалы используются при создании новых семейств сенсоров, термоиндикаторов и детекторов давления [3,4]. На формирование течений в этих микро- и наноразмерных каналах и капиллярах оказывают сильное влияние внешние силы, такие как электрические поля и механические воздействия, а также геометрия ЖК-каналов и характер приповерхностной ориентации поля директора. В связи с этим всестороннее исследование динамических режимов переориентации поля директора и релаксации компонент тензора напряжения в микроскопических объемах ЖК-фаз под действием сильного электрического поля ($\geq 1\,\mathrm{V}/\mu\mathrm{m}$) позволит понять и, как следствие, улучшить динамические характеристики сенсоров, терморегуляторов и датчиков, применяемых в медицинской диагностике и биологических лабораториях на чипах.

Одним из менее затратных, и в тоже время кратчайших, путей к пониманию особенностей динамической переориентации поля директора $\hat{\mathbf{n}}(\mathbf{r}, t)$ в ЖК-фазе, инкапсулированной в микро- и наноразмерные объемы, под действием сильного электрического поля $\mathbf{E}$, является теоретическое моделирование гидродинамических и релаксационных процессов, возникающих в этих молекулярных системах. В случае отсутствия электрического поля ($E = 0$) ориентация ЖК-фазы, помещенной в канал, определяется граничной ориентацией (гомеотропной, планарной и наклонной) молекул ЖК-материала. В момент включения электрического поля $\mathbf{E}$, направленного, например, практически перпендикулярно планарно ориентированному нематику, молекулы, образующие ЖК-фазу, начинают переориентацию вдоль $\mathbf{E}$ (рис. 1). Это приводит к возникновению конкуренции с приповерхностными силами, которые транслируются в объем

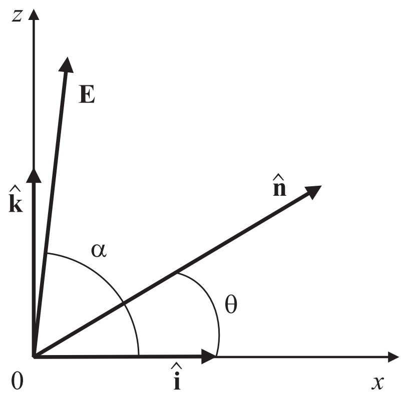

Рис. 1. Координатная система. Орт $\hat{\mathbf{i}}$ направлен параллельно, а орт $\hat{\mathbf{k}}$ перпендикулярно к нижней ограничивающей поверхности ЖК-канала. Вектор электрического поля $\mathbf{E}$ и вектор поля директора $\hat{\mathbf{n}}$ направлены под углом α и θ к нижней горизонтальной ограничивающей поверхности ЖК-канала соответственно.

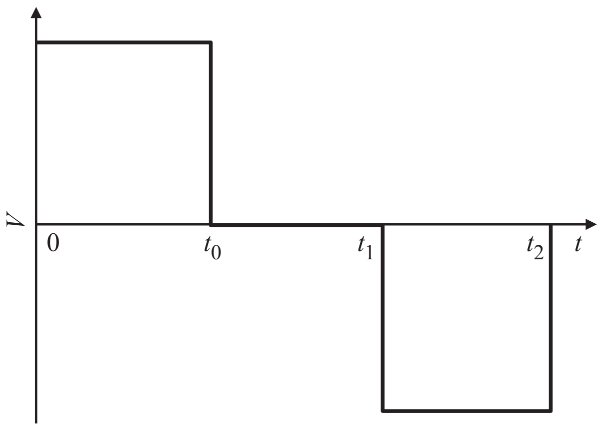

Рис. 2. Три режима включения электрического поля **E**.

ЖК-фазы посредством ориентационной упругости, присущей всем ЖК-материалам. При значениях величины поля $E > E_{\text{th}}$ молекулы ЖК-фазы однородно разворачиваются в сторону вектора **E** [5]. Здесь E_{th} некоторое пороговое значение внешнего электрического поля, при достижении которого начинается переориентация поля директора (переход Фредерикса [5]). Эта величина зависит от конкретного ЖК-материала и его размеров. В случае $E \gg E_{\text{th}}$ ЖК-система может быть выведена из равновесного состояния и любые малые отклонения начальной ориентации поля директора, вызванные, например, термофлуктуациями, могут начать экспоненциально расти со своими коэффициентами роста, которые обратно пропорциональны некоторой эффективной вращательной вязкости ЖК-материала [6]. При классическом переходе Фредерикса однородный поворот молекул ЖК-фазы происходит в плоскости, образованной полем директора $\hat{\mathbf{n}}$ и полем **E**, и характеризуется сравнительно большим эффективным коэффициентом вращательной вязкости и отсутствием течения ЖК-фазы. С другой стороны, в случае $E \gg E_{\text{th}}$ в процессе переориентации поля директора $\hat{\mathbf{n}}$ могут возникнуть переходные квазипериодические структуры, если соответствующая мода искажения обладает наибыстрейшим откликом и, таким образом, подавляет все остальные моды, в том числе и однородные [7]. При квазипериодическом искажении ЖК-фазы появляется сдвиговая вязкость, уменьшающая общую эффективную вращательную вязкость, связанную с переориентацией поля директора. Возникающие при этом вращающиеся домены способствуют уменьшению эффективной вязкости, характеризующей скорость диссипации энергии, и тем самым создают более выгодные, по сравнению с однородным поворотом, режимы переориентации поля директора.

Исследование этих новых состояний будет проведено в рамках нелинейного обобщения классической теории Эриксена–Лесли [8,9] с учетом балансов массы, импульсов и моментов, действующих на единицу объема ЖК-материала. Численные исследования характера переориентации поля директора и формирование релаксационных режимов компонент тензора напряжения в микроразмерных ЖК-каналах, образованных молекулами 4-n-пентил-4′-цианобифенила (5ЦБ), будут проведены для трех динамических режимов. Первым будет изучен режим (режим I) включения электрического поля $\mathbf{E} > 0$, направленного вдоль оси z, в течение времени $0 < t < t_0$ (см. рис. 2), т.е. практически перпендикулярно планарно ориентированному нематику. Вторым будет изучен режим (режим II), когда электрическое поле $(E = 0)$ выключено в течение времени $t_0 \le t < t_1$. И наконец, третим будет изучен режим (режим III) включения электрического поля $\mathbf{E} < 0$ в отрицательном направлении вдоль оси z, в течение времени $t_1 \le t < t_2$ (см. рис. 2).

2. Основные уравнения

Рассмотрим длинный прямоугольный ЖК-канал с размерами $2L$ и $2d$ $(L \gg d)$, ограниченный твердыми горизонтальными и вертикальными поверхностями. Допустим, что директор планарно ориентирован на горизонтальных ограничивающих поверхностях и гомеотропно на вертикальных, причем рассмотрим случай, характеризующийся сильным сцеплением ЖК-молекул со всеми твердыми поверхностями. В этом случае система координат отсчитывается от центра ЖК-канала так, что ось X и орт $\hat{\mathbf{i}}$ совпадают с направлением директора на нижней горизонтальной поверхности $(\hat{\mathbf{i}} \parallel \hat{\mathbf{n}}_{z=-d})$, в то время как ось Z и орт $\hat{\mathbf{k}}$ направлены ортогонально $(\hat{\mathbf{k}} \perp \hat{\mathbf{n}}_{z=-d})$, а орт $\hat{\mathbf{j}} = \hat{\mathbf{k}} \times \hat{\mathbf{i}}$ (см. рис. 1). Таким образом, в начальный момент времени мы имеем дело с планарно и однородно ориентированным ЖК-образцом, образованным молекулами 5ЦБ, притом, что вектор электрического поля $\mathbf{E} = E_x\hat{\mathbf{i}} + E_z\hat{\mathbf{k}} = E(z)\cos\alpha\hat{\mathbf{i}} + E(z)\sin\alpha\hat{\mathbf{k}}$ направлен под углом α $(\sim \frac{\pi}{2})$ к горизонтальным поверхностям ЖК-канала. После включения электрического поля **E**, направленного практически ортогонально к планарно и однородно ориентированному ЖК-каналу, в ЖК-фазе начинается переориентация полярных молекул и, как следствие, переориентация $\hat{\mathbf{n}}(\mathbf{r}, t)$ вдоль направления вектора **E**. Этот процесс переориентации сопровождается формированием поля скорости $\mathbf{v}(\mathbf{r}, t)$ в объеме ЖК-фазы.

Будем предполагать, что переориентация поля директора $\hat{\mathbf{n}} = n_x\hat{\mathbf{i}} + n_z\hat{\mathbf{k}} = \cos\theta(x, z, t)\hat{\mathbf{i}} + \sin\theta(x, z, t)\hat{\mathbf{k}}$ под действием электрического поля **E** осуществляется в плоскости XOZ. Здесь θ — угол, образованный директором $\hat{\mathbf{n}}$ и ортом $\hat{\mathbf{i}}$ (см. рис. 1). Таким образом, формирование гидродинамического течения $\mathbf{v}(\mathbf{r}, t)$, обусловленного переориентацией поля директора $\hat{\mathbf{n}}$, под действием сильного электрического поля **E** может быть описано в рамках нелинейного обобщения классической теории Эриксена–Лесли [8,9], которое учитывает баланс массы, импульсов и угловых моментов, действующих на единицу ЖК-фазы, а также закон сохранения зарядов. Принимая во внимание микроскопические размеры ЖК-канала, мы можем предположить, что плотность

ЖК-системы постоянна, и мы имеем дело с несжимаемой жидкостью. Условие несжимаемости ЖК-материала $\nabla \cdot \mathbf{v} = 0$, или $u_x + w_z = 0$, выполняется за счет введения безразмерной функции тока $\bar{\psi} = \frac{4\gamma_1}{\epsilon_0 \epsilon_a} \frac{1}{U^2} \psi$, где безразмерные компоненты вектора скорости $\mathbf{v} = u\hat{\mathbf{i}} + w\hat{\mathbf{k}}$ выражены через ψ как $u = \frac{\partial \psi}{\partial z} = \psi_{,z}$ и $w = -\frac{\partial \psi}{\partial x} = -\psi_{,x}$ соответственно. Здесь и далее мы используем безразмерные пространственные переменные $\bar{x} = x/d$ и $\bar{z} = z/d$, а также безразмерное время $\tau = \frac{\epsilon_0 \epsilon_a}{\gamma_1^2} \left(\frac{U}{2d}\right)^2$, причем в дальнейшем верхняя черта над пространственными переменными и функцией тока будет опущена, ϵ_0 — диэлектрическая проницаемость вакуума, ϵ_a — диэлектрическая анизотропия ЖК-системы, γ_1 и γ_2 — коэффициенты вращательной вязкости, а $U = 2Ed$ — величина напряжения. Баланс моментов, действующих на единицу объема ЖК-фазы, в безразмерном виде может быть записан как [7,10]

$$\theta_{,\tau} = \Big[\Delta_1 \theta_{,xx} + \Delta_2 \theta_{,zz} + \Delta_3 \left(-2\theta_{,xz} - \theta_{,x}^2 + \theta_{,z}^2\right) + \Delta_4 \theta_{,x} \theta_{,z}\Big] + \frac{1}{2}\bar{E}^2(z) \sin 2(\alpha - \theta) + \frac{1}{2}(\psi_{,xx} + \psi_{,zz}) - \psi_{,z}\theta_{,z} + \psi_{,x}\theta_{,x} + \gamma \left[\sin 2\theta \psi_{,xz} + \frac{1}{2}(\psi_{,xx} - \psi_{,zz})\right], \qquad (1)$$

где $\Delta_1 = \sin^2\theta + K_{31}\cos^2\theta$, $\Delta_2 = \cos^2\theta + K_{31}\sin^2\theta$, $\Delta_3 = \frac{(1-K_{31})}{2}\sin 2\theta$, $\Delta_4 = (K_{31} - 1)\cos 2\theta$, $\gamma = \gamma_2/\gamma_1$, $K_{31} = K_3/K_1$, а K_1 и K_3 — коэффициенты упругости, соответствующие изгибным и продольным деформациям. Безразмерное уравнение Навье–Стокса, записанное с помощью функции тока ψ, имеет вид [10]

$$\delta_2 \left[(\Delta\psi)_{,\tau} + \psi_{,z}(\Delta\psi)_{,x} - \psi_{,x}(\Delta\psi)_{,z}\right] = \hat{\mathscr{L}}\psi + \mathscr{F}, \qquad (2)$$

где $\Delta\psi = \psi_{,xx} + \psi_{,zz}$, а оба оператора $\hat{\mathscr{L}}$ и $\mathscr{F}$ приведены в Приложении. Здесь

$$\delta_1 = \frac{4K_1}{\epsilon_0 \epsilon_a U^2}, \quad \delta_2 = \frac{\rho \epsilon_0 \epsilon_a}{4\gamma_1^2} U^2$$

— два параметра ЖК-системы, а функция

$$\bar{E}(z) = \frac{2d}{U} \sin\alpha E(z)$$

описывает безразмерное электрическое поле. В свою очередь, безразмерное электрическое поле удовлетворяет основному уравнению электростатики для диэлектриков

$$\frac{\partial}{\partial z}\left[\left(\frac{\epsilon_\perp}{\epsilon_a} + \sin\theta\right)\bar{E}(z)\right] = 0, \quad \int_{-1}^{1} \bar{E}(z)dz = 1, \qquad (3)$$

где $\epsilon_\perp$ — величина диэлектрической проницаемости ЖК-материала в направлении, перпендикулярном полю директора $\hat{\mathbf{n}}$.

Мы будем рассматривать ЖК-канал с размерами $L/d = 10$, помещенный между двумя электродами таким образом, что вектор $\mathbf{E}$ направлен под углом α к орту $\hat{\mathbf{i}}$. Будем изучать случай жесткого сцепления, когда граничные условия для угла θ могут быть записаны в виде

$$\theta_{-10<x<10, z=\pm 1} = \theta_{x=\pm 10, -1<z<1} = 0. \qquad (4)$$

Поле скорости $\mathbf{v}$ подчиняется условию прилипания на твердых ограничивающих поверхностях ЖК-канала и может быть записано с помощью безразмерной функции тока как

$$(\psi_{,z})_{-10<x<10, z=\pm 1} = (\psi_{,z})_{x=\pm 10, -1<z<1} = 0,$$

$$(\psi_{,x})_{-10<x<10, z=\pm 1} = (\psi_{,x})_{x=\pm 10, -1<z<1} = 0. \qquad (5)$$

Уравнения (1)–(3) необходимо дополнить начальными условиями как для поля директора, так и для поля скорости. Начальное условие для угла θ мы выберем в виде

$$\theta(x, z, 0) = \theta_0 \cos\theta(q_z z) \cos\theta(q_x x), \qquad (6)$$

где θ_0 — амплитуда, а q_x и q_z — волновые числа соответствующей Фурье-моды. В нашем случае волновые числа q_x и q_z соответствующей Фурье-моды имеют вид [7]

$$q_x = \frac{\pi}{20}(2k + 1), \; k = 0, 1, 2, \ldots,$$

$$q_z = \frac{\pi}{20}(2l + 1), \; l = 0, 1, 2, \ldots. \qquad (7)$$

В свою очередь, начальное условие для скорости $v(x, z, 0) = 0$, записанное с помощью функции тока, принимает вид

$$\psi(x, z, 0) = 0. \qquad (8)$$

Следует отметить, что в процессе переориентации поля директора под действием сильного электрического поля баланс импульсов и угловых моментов, действующих на единицу ЖК-объема, разворачивает поле директора к его равновесному распределению $\hat{\mathbf{n}}_{eq}$ по всему объему ЖК-фазы, которое описывается углом $\theta_{eq}(x, z)$. Время, необходимое для переориентации поля директора в положение $\theta_{eq}(x, z)$, есть время релаксации τ_R системы. Его величина зависит от величины электрического поля $\bar{E}$ и углов α и θ_0. В свою очередь, безразмерные волновые числа q_x и q_z определяются из условия минимума полной энергии $W = W_{\text{elast}} + W_{\text{el}}$, где

$$\frac{2}{\delta_1} W_{\text{elast}} = \int dx \int dz \Big[\left((\theta_{eq})_{,x}^2 + (\theta_{eq})_{,z}^2\right) \times \left(\sin^2\theta_{eq} + K_{31}\cos^2\theta_{eq}\right)\Big] + \int dx \int dz (K_{31} - 1) \sin 2\theta_{eq} (\theta_{eq})_{,x} (\theta_{eq})_{,z} \qquad (9)$$

— вклад упругих сил, а

$$W_{\mathrm{el}} = -\int dx \int dz E\,(\theta_{eq}) \cos^2(\theta_{eq} - \alpha) \tag{10}$$

— вклад электрических сил в общую энергию W соответственно.

Таким образом, система уравнений $(1)-(3), (7)$ и $(9), (10)$, дополненная граничными $(4), (5)$ и начальными условиями (6) и (8), образует самосогласованную систему нелинейных дифференциальных уравнений в частных производных, описывающих эволюцию как поля директора $\hat{\mathbf{n}}$, так и поля скорости $\mathbf{v}$ к их равновесным распределениям по всему объему микрометрового ЖК-канала под действием сильного электрического поля $\mathbf{E}$, направленного под углом α к горизонтальным ограничивающим поверхностям.

Располагая значениями угла $\theta\,(x, z, \tau)$ в процессе его релаксации к равновесному распределению по всему ЖК-каналу, мы можем также расчитать не только эволюцию угловой скорости $\boldsymbol{\omega}$ поля директора $\hat{\mathbf{n}}$

$$\boldsymbol{\omega} = \hat{\mathbf{n}} \times \dot{\hat{\mathbf{n}}} = -\dot{\theta}\,(x, z, \tau)\,\hat{\mathbf{j}} = -\omega\,(x, z, \tau)\,\hat{\mathbf{j}}, \tag{11}$$

но и эволюцию компонент тензора напряжения (ТН)

$$\sigma_{xx} = \frac{1}{4}\left(E^2 - \mathscr{A}\right)\sin 2\theta,$$

$$\sigma_{zz} = \sigma_{xx} + \frac{1}{2}\mathscr{B}\sin 2\theta + \left(\frac{\epsilon_\perp}{\epsilon_a} + \sin^2\theta\right)E^2,$$

$$\sigma_{xz} = \frac{1}{4}\left(-E^2 + \mathscr{A}\right)\sin 2\theta,$$

$$\sigma_{zx} = \frac{1}{4}\left(E^2 + \mathscr{A}\right)\sin 2\theta, \tag{12}$$

где $\mathscr{A} = \frac{\gamma_2}{\gamma_1}\cos 2\theta E^2$ и $\mathscr{B} = \frac{\gamma_2}{\gamma_1}\sin 2\theta E^2$ — безразмерные функции. В нашем случае безразмерные компоненты ТН принимают вид

$$\sigma_{ij} = \mathscr{P}\delta_{ij} + \sigma_{ij}^{\mathrm{el}} + \sigma_{ij}^{\mathrm{vis}} + \delta_1\sigma_{ij}^{\mathrm{elast}},$$

где $\mathscr{P}$ — гидростатическое давление в ЖК-канале, а $\sigma_{ij}^{\mathrm{el}}$, $\sigma_{ij}^{\mathrm{vis}}$ и $\sigma_{ij}^{\mathrm{elast}}$ — безразмерные компоненты ТН, соответствующие электрическим, вязким и упругим силам соответственно.

Для случая нематика, образованного молекулами 5ЦБ, при температуре 300 K и плотности $10^3\,\mathrm{kg/m^3}$, а также величине напряжения в $U = 200\,\mathrm{V}$, приложенного поперек ЖК-канала толщиной в $200\,\mu\mathrm{m}$, значения параметров, которые входят в вышеописанные уравнения, равны: $\delta_1 = 8.6 \cdot 10^{-6}$, $\delta_2 = 0.19$, $\gamma = -1.1$ и $K_{31} = 1.17$. Следует отметить, что величина порогового напряжения в нашем случае равна $E_{\mathrm{th}} \sim 1.05 \times 10^4\,\mathrm{V/m}$, так что $E \sim 100E_{\mathrm{th}}$, а толщина и величина напряжения, приложенного поперек ЖК-канала, соответствовали данным, использованным при исследовании эволюции ЯМР-спектров в ЖК-ячейках, образованных молекулами дейтерированного 4-n-пентил-4′-цианобифенила [6].

Принимая во внимание тот факт, что $\delta_1 \ll 1$, упругим вкладом в ТН можно пренебречь, в то время как вязкий вклад в ТН σ_{ij} может быть переписан в виде

$$\sigma_{xx}^{\mathrm{vis}} = -\frac{1}{4}\mathscr{B}\sin 2\theta,$$

$$\sigma_{xz}^{\mathrm{vis}} = \frac{1}{4}\left(-E^2 + \mathscr{A}\right)\sin 2\theta,$$

$$\sigma_{zx}^{\mathrm{vis}} = \frac{1}{4}\left(E^2 + \mathscr{A}\right)\sin 2\theta,$$

и

$$\sigma_{zz}^{\mathrm{vis}} = -\sigma_{xx}^{\mathrm{vis}}.$$

В нашем случае, когда электрическое поле $\mathbf{E}$ приложено поперек ЖК-канала, вклад электрических сил в общий ТН $\sigma_{ij}^{\mathrm{el}} = \frac{1}{2}\left(E_i D_j + D_i E_j\right)$ имеет только одну компоненту

$$\sigma_{zz}^{\mathrm{el}} = \left(\frac{\epsilon_\perp}{\epsilon_a} + \sin^2\theta\right)E^2,$$

где $\mathbf{D}$ — вектор электрической индукции. С другой стороны, в нашем случае гидродинамическое давление имеет вид

$$\mathscr{P} = \frac{1}{4}\left(\mathscr{B} - \mathscr{A} + E^2\right)\sin 2\theta,$$

поскольку оно удовлетворяет уравнению

$$\sigma_{xx,x} + \sigma_{xz,x} + \mathscr{P}_{,x} = 0.$$

3. Эволюция поля директора, скорости и компонент ТН в ЖК-канале под действием сильного электрического поля

Когда сильное электрическое поле $\mathbf{E} = E\hat{\mathbf{k}}$ ($E \sim 100E_{\mathrm{th}}$) (в положительном смысле) включено в момент времени $\tau = 0$, под углом α ($\sim \frac{\pi}{2}$) к горизонтальным ограничивающим поверхностям ЖК-канала, планарно и однородно ориентированный нематический образец, образованный молекулами 5ЦБ, стремится переориентироваться в направлении вектора $\mathbf{E}$. Этот процесс переориентации описывается углом $\theta(x, z, \tau)$, а инициируемое разворотом директора $\hat{\mathbf{n}}$ поле скорости $\mathbf{v} = u(x, z, \tau)\hat{\mathbf{i}} + w(x, z, \tau)\hat{\mathbf{k}}$ описывается системой нелинейных дифференциальных уравнений в частных производных $(1)-(3), (9)$ и (10), дополненной граничными $(4), (5)$ и начальными (6) и (8) условиями, как для угла θ, так и для функции тока ψ, при том, что значения волновых чисел q_x и q_z определяются из условия минимума полной энергии $W = W_{\mathrm{elast}} + W_{\mathrm{el}}$. Для случая нематика, образованного молекулами 5ЦБ, при температуре 300 K и плотности $10^3\,\mathrm{kg/m^3}$, величина порогового напряжения равна $E_{\mathrm{th}} \sim 1.05 \cdot 10^4\,\mathrm{V/m}$, так что $E \sim 100E_{\mathrm{th}}$. Наш предыдущий анализ подобных систем показал, что при определенном балансе упругих, вязких и электрических моментов и импульсов, действующих на единицу объема ЖК-фазы, существует

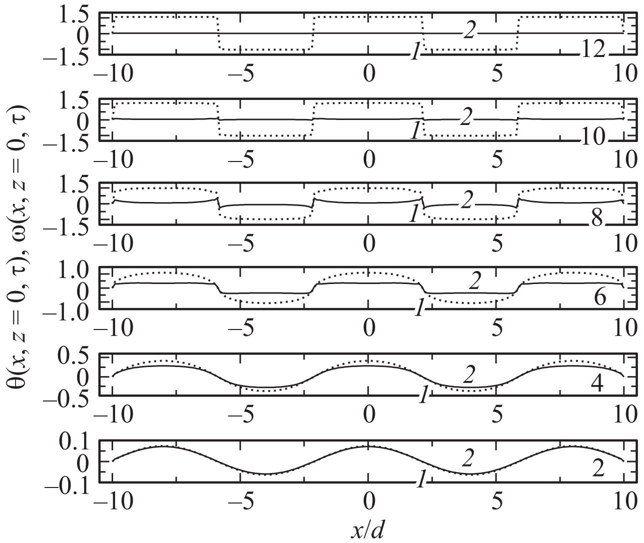

Рис. 3. Эволюция распределения угла $\theta(x, z = 0, \tau)$ (кривые *1*) и угловой скорости $\omega(x, z = 0, \tau)$ (кривые *2*) вдоль оси $x \in [-10, 10]$ к их равновесным распределениям $\theta_{eq}(x, z = 0, \tau = \tau_R(\text{in}) = 12)$ и $\omega_{eq}(x, z = 0, \tau = \tau_R(\text{in}) = 12)$ соответственно, под действием сильного электрического поля $\mathbf{E} = E\hat{\mathbf{k}}$ $(E \sim 1.05\ V/\mu m)$, направленного под углом $\alpha = 1.57$ $(\sim 89.96^\circ)$ к горизонтальным ограничивающим поверхностям ЖК-канала. Промежуточные состояния соответствуют временам $\tau = 2$ $(\sim 12\,\text{ms})$, 4 $(\sim 24\,\text{ms})$, 6 $(\sim 36\,\text{ms})$, 8 $(\sim 48\,\text{ms})$ и 12 $(\sim 72\,\text{ms})$ соответственно.

пороговое значение амплитуды угла θ_0^{th}, выше которого характер переориентации поля директора претерпевает как качественное, так и количественное изменение [10]. Так, было показано, что при всех прочих равных условиях, при $\theta < \theta_0^{\text{th}}$, поле директора $\hat{\mathbf{n}}(x, z, \tau)$ разворачивается в направлении вектора $\mathbf{E}$ $(|\mathbf{E}| \sim 100E_{\text{th}})$ как единое целое, т. е. как монодомен. В то же время при значениях $\theta \ge \theta_0^{\text{th}}$ переориентация поля директора характеризуется формированием квазипериодических структур по всему объему, занимаемому ЖК-фазой [10]. На рис. 3 (кривые *1*, точечные линии) представлены результаты расчета эволюции угла $\theta(x, z = 0, \tau)$ к его равновесному распределению $\theta_{eq}(x, z = 0)$ вдоль оси $x \in [-10, 10]$, которое достигается спустя $\tau_R(\text{in}) = 12$ $(\sim 72\,\text{ms})$ единиц безразмерного времени. Эти расчеты были получены для случая жесткого сцепления ЖК-молекул с ограничивающими поверхностями, при значениях углов $\alpha = 1.57$ $(\sim 89.96^\circ)$ и $\theta_0 = 0.01$ $(\sim 1.1^\circ)$, а критерий сходимости итерационной процедуры был выбран равным $\epsilon = |\left(\theta_{(m+1)} - \theta_{(m)}\right)/\theta_{(m)}| \sim 10^{-4}$ и итерационная процедура продолжалась до достижения заданной точности [11]. Промежуточные состояния соответствуют временам $\tau = 2 (\sim 12\,\text{ms})$, 4 $(\sim 24\,\text{ms})$, 6 $(\sim 36\,\text{ms})$, 8 $(\sim 48\,\text{ms})$ и 12 $(\sim 72\,\text{ms})$ соответственно. Здесь безразмерное время $\tau = \frac{\epsilon_0\epsilon_a}{\gamma_1}\left(\frac{U}{2d}\right)^2 t$ отсчитывалось с момента включения электрического поля. В этом случае равновесное распределение угла $\theta_{eq}(x, z = 0)$ вдоль оси $x \in [-10, 10]$ характеризуется отчетливо выраженной квазипериодической структурой с узлами в точках $x = \pm 2.175$ и ± 5.83. Отметим, что величины волновых чисел q_x и q_z, которые обеспечивают минимум энергии $W_{\text{elast}} + W_{\text{el}}$, равны $q_x = 0.785$ и $q_z = 64.336$. Эволюция распределения безразмерной угловой скорости $\omega(x, z = 0, \tau)$ к ее равновесному распределению $\omega_{eq}\big(x, z = 0, \tau = \tau_R(\text{in})\big) = 0$, вдоль оси $x \in [-10, 10]$, представлена на рис. 3 (кривые *2*, сплошные линии). Промежуточные состояния соответствуют безразмерным временам $\tau = 2$ $(\sim 12\,\text{ms})$, $\tau = 4$ $(\sim 24\,\text{ms})$, $\tau = 6$ $(\sim 36\,\text{ms})$, $\tau = 8$ $(\sim 48\,\text{ms})$, $\tau = 10$ $(\sim 60\,\text{ms})$, и $\tau = \tau_R(\text{in}) = 12$ $(\sim 72\,\text{ms})$ соответственно. В течение первых 4 единиц безразмерного времени $(\sim 24\,\text{ms})$ распределение угловой скорости $\omega(x, z = 0, \tau)$ практически следует за распределением угла $\theta(x, z = 0, \tau)$. При этом отчетливо видно, как начинают формироваться в ЖК-канале несколько вихрей, причем положения узлов решетки задают границы формируемых вихрей. Так, согласно нашим расчетам, представленным на рис. 3 (кривые *2*), отчетливо наблюдаются три вихря $(-10 < x < -5.83$, $-2.175 < x < 2.175$ и $5.83 < x < 10)$, вращающихся по часовой стрелке, и два вихря $(-5.83 < x < -2.175$ и $2.175 < x < 5.83)$, вращающихся против часовой стрелки. Спустя время $\tau = 10$ $(\sim 60\,\text{ms})$ вращение вихрей практически полностью прекратилось и установилось равновесное распределение поля директора вдоль оси $x \in [-10, 10]$, характеризующееся отчетливо выраженной квазипериодической структурой с узлами в точках $x = \pm 2.175$ и ± 5.83.

Теперь, располагая распределением угла $\theta(x, z, \tau)$, мы можем, используя уравнение (12), расчитать безразмерные компоненты ТН

$$\sigma_{ij}(x, z, \tau) = \left(\frac{4d^2}{\epsilon_0\epsilon_a U^2}\right)\bar{\sigma}_{ij}(x, z, \tau),$$

где $\bar{\sigma}_{ij}(x, z, \tau)$ — размерные значения тензора напряжения. Эволюция безразмерных сдвиговых компонент ТН $\sigma_{xz}(x, z = 0, \tau)$ и $\sigma_{zx}(x, z = 0, \tau)$ (рис. 4, *a, b*) и нормальной компоненты $\sigma_{xx}(x, z = 0, \tau)$ (рис. 5, *b*) к их равновесным значениям в шести точках, отстоящих на расстояниях $x = 0.5$ (кривая *1*), 1.6 (кривая *2*), 2.16 (кривая *3*), 2.18 (кривая *4*), 2.32 (кривая *5*) и 3.42 (кривая *6*) от центра ЖК-канала, в течение первых 20 единиц безразмерного времени показаны на рис. 4 и 5. Расчеты свидетельствуют о том, что абсолютные величины двух сдвиговых компонент ТН $|\sigma_{zx}|$ и $|\sigma_{xz}|$, а также нормальной компоненты $|\sigma_{xx}|$ на начальном этапе эволюции, соответствующем временам $\tau \sim 4 \div 6$ $(\sim 24 \div 36\,\text{ms})$, достигают максимальных значений ~ 0.3 $(\sim 6.6\,\text{Pa})$, а затем быстро убывают к нулю. В свою очередь, безразмерная нормальная компонента ТН $\sigma_{zz}(x, z = 0, \tau)$ (рис. 5, *a*) на начальном этапе эволюции, соответствующем временам $\tau \sim 4 \div 7$ $(\sim 24 \div 42\,\text{ms})$, осциллирует около значения ~ 0.5 $(\sim 10\,\text{Pa})$, для всех вышеуказанных значений расстояния вдоль оси x, а затем

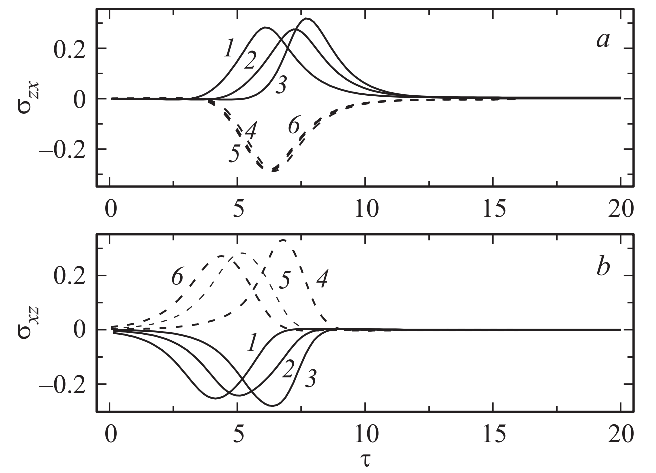

Рис. 4. Эволюция сдвиговых компонент ТН $\sigma_{zx}(x, z = 0, \tau)$ (a) и $\sigma_{xz}(x, z = 0, \tau)$ (b) в точках $x = 0.5$ (кривые *1*), $x = 1.6$ (кривые *2*), $x = 2.16$ (кривые *3*), $x = 2.18$ (кривые *4*), $x = 2.32$ (кривые *5*) и $x = 3.42$ (кривые *6*) соответственно к их равновесным распределениям σ_{zx}^{eq} и σ_{xz}^{eq} под действием сильного электрического поля $\mathbf{E} = E\hat{\mathbf{k}}$ $(E \sim 1.05\,\mathrm{V}/\mu\mathrm{m})$, направленного под углом $\alpha = 1.57$ $(\sim 89.96^\circ)$ к горизонтальным ограничивающим поверхностям ЖК-канала.

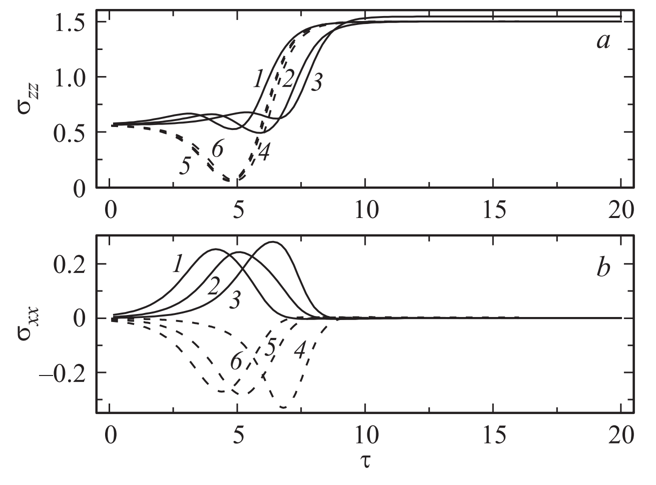

Рис. 5. То же, что на рис. 4, только для нормальных компонент ТН $\sigma_{zz}(x, z = 0, \tau)$ (a) и $\sigma_{xx}(x, z = 0, \tau)$ (b) соответственно.

монотонно возрастает и на конечном этапе эволюции давление растяжения σ_{zz}, обусловленное сильным электрическим полем $\mathbf{E} = E\hat{\mathbf{k}}$ $(E \sim 1.05\,\mathrm{V}/\mu\mathrm{m})$, достигает величины ~ 1.5 $(\sim 33\,\mathrm{Pa})$. Следует отметить, что вблизи узла $x = 2.175$, в точках $x = 2.16$ (кривые *3*) и $x = 2.18$ (кривые *4*), как сдвиговые компоненты ТН $\sigma_{xz}(x, z = 0, \tau)$ (рис. 4, b) и $\sigma_{zx}(x, z = 0, \tau)$ (рис. 4, a), так и нормальная компонента $\sigma_{xx}(x, z = 0, \tau)$ (рис. 5, b) меняют знак, что свидетельствует о том, что в окрестности узла $x = 2.175$ возникли разнонаправленные вихревые течения, инициируемые сильным электрическим полем $E \sim 100E_{\mathrm{th}}$.

Предположим далее, что в момент времени $\tau = 20$ $(\sim 0.12\,\mathrm{s})$ электрическое поле будет выключено, т. е. $E = 0$. В этом случае поле директора $\hat{\mathbf{n}}(x, z, \tau)$ под действием вязких, упругих и поверхностных сил и моментов, действующих на единицу объема ЖК-фазы, начинает переориентироваться из состояния, характеризующегося углом $\theta_{eq}(x, z)$, в состояние, характеризующееся планарной ориентацией ЖК-канала. При этом угол $\theta(x, z, \tau)$ должен стремиться к нулю. Следует отметить, что время релаксации $\tau_R(\mathrm{off})$, в связи с малостью вязких, упругих и поверхностных сил и моментов, по сравнению с электрическими, значительно больше времен $\tau_R(\mathrm{in})$. На рис. 6 (кривые *1*) представлены результаты расчетов эволюций угла $\theta(x, z = 0, \tau)$ вдоль оси $x \in [-10, 10]$ для случая жесткого сцепления ЖК-молекул с ограничивающими поверхностями для следующих, после выключения электрического поля, 20 единиц безразмерного времени. Здесь представлены состояния, соответствующие временам $\tau = 22$ $(\sim 0.132\,\mathrm{s})$, 24 $(\sim 0.144\,\mathrm{s})$, 26 $(\sim 0.156\,\mathrm{s})$, 30 $(\sim 0.18\,\mathrm{s})$, 35 $(\sim 0.21\,\mathrm{s})$, и $\tau = 40$ $(\sim 0.24\,\mathrm{s})$. Результаты расчетов указывают на то, что быстрее релаксируют области, удаленные от положений узлов квазипериодической структуры, т. е. вблизи точек $x = \pm 2.175$ и ± 5.83. Безразмерное время релаксации $\tau_R(\mathrm{off})$ поля директора к планарно ориентированному распределению по всему объему ЖК-канала равно 400, или $\sim 2.4\,\mathrm{s}$. Эволюция распределения безразмерной угловой скорости $\omega(x, z = 0, \tau)$ к ее равновесному распределению

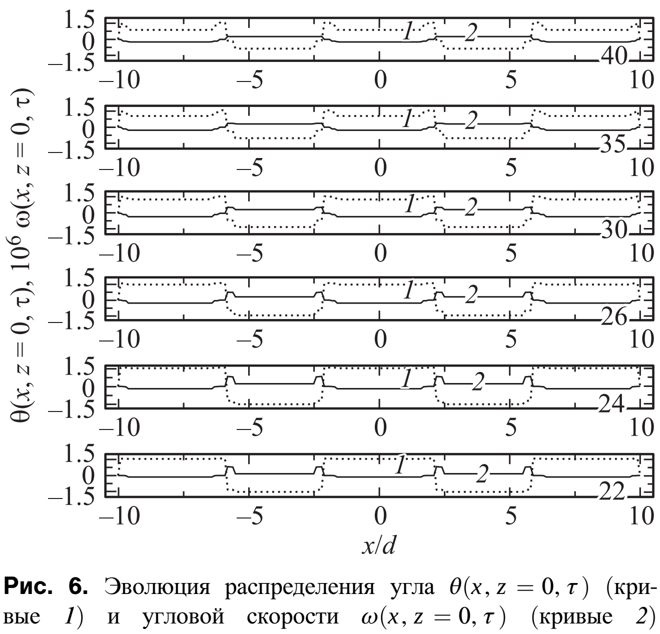

Рис. 6. Эволюция распределения угла $\theta(x, z = 0, \tau)$ (кривые *1*) и угловой скорости $\omega(x, z = 0, \tau)$ (кривые *2*) вдоль оси $x \in [-10, 10]$ к их равновесным распределениям $\theta_{eq}\big(x, z = 0, \tau = \tau_R(\mathrm{off})\big)$ и $\omega_{eq}\big(x, z = 0, \tau = \tau_R(\mathrm{off})\big)$ соответственно, с момента отключения электрического поля $\mathbf{E} = 0$. Промежуточные состояния соответствуют временам $\tau = 22$ $(\sim 0.132\,\mathrm{s})$, 24 $(\sim 0.144\,\mathrm{ms})$, 26 $(\sim 0.156\,\mathrm{s})$, 30 $(\sim 0.18\,\mathrm{s})$, 35 $(\sim 0.21\,\mathrm{s})$ и 40 $(\sim 0.24\,\mathrm{s})$ соответственно.

$\omega_{eq}(x, z = 0, \tau = \tau_R(\text{off})) = 0$, вдоль оси $x \in [-10, 10]$, в течение следующих 20 единиц времени после выключения электрического поля показана на рис. 6 (кривые *2*). Представлены состояния, соответствующие тем же безразмерным временам, что и для угла $\theta\big(x, z = 0, \tau = \tau_R(\text{off})\big)$. Следует отметить, что в течение первых 6 единиц безразмерного времени после выключения электрического поля абсолютная величина угловой скорости $|\omega(x, z, \tau)|$ достигает незначительного максимального значения вблизи узлов квазипериодической структуры в точках $x = \pm 2.175$ и ± 5.83, а затем, в течение следующих 14 единиц безразмерного времени, быстро релаксирует к нулю. При этом абсолютная величина угловой скорости $\omega(\text{off})$ примерно на 6 порядков меньше абсолютной величины $\omega(\text{in})$.

Наконец, рассмотрим третий случай, когда сильное электрическое поле $\mathbf{E} = -E\hat{\mathbf{k}}$ ($E \sim 1.05\,\text{V}/\mu\text{m}$) включено в момент времени $\tau = 248$ (случай A) или 250 (случай B) (в отрицательном смысле), под углом $\alpha(\sim -\frac{\pi}{2})$ к горизонтальным ограничивающим поверхностям ЖК-канала. Следует отметить, что в обоих случаях A и B отсчет времени начался с момента включения электрического поля $\mathbf{E} = E\hat{\mathbf{k}}$. Этот процесс переориентации поля директора из положения $\hat{\mathbf{n}}^{\text{off}}$ в направлении вектора $\mathbf{E}$ описывается углом $\theta(x, z, \tau)$. Здесь $\hat{\mathbf{n}}^{\text{off}}$ — ориентация поля директора спустя время $\tau\,(\text{off})$, т.е. ориентация, соответствующая планарно и однородно ориентированному нематическому образцу. Как и в случае $\mathbf{E} = E\hat{\mathbf{k}}$, процесс переориентации $\hat{\mathbf{n}}$ описывается системой нелинейных дифференциальных уравнений в частных производных (1)–(3), (9) и (10), дополненной граничными (4), (5) и начальными (6) и (8) условиями, как для угла θ, так и для функции тока ψ, при том, что значения волновых чисел q_x и q_z определяются из условия минимума полной энергии $W = W_{\text{elast}} + W_{\text{el}}$. Выбор двух времен, $\tau = 248$ (случай A) или 250 (случай B), включения электрического поля $\mathbf{E} = -E\hat{\mathbf{k}}$ влияет на величину порогового значения амплитуды угла θ_0^{th} и, тем самым, на характер переориентации поля директора под действием сильного электрического поля. Так, в случае A ($\tau = 248$) электрическое поле $\mathbf{E}$ было выключено в течение $\tau\,(\text{off}) = 248 - 20 = 228$ единиц безразмерного времени. Таким образом, в случае A начальное условие для угла θ принимает вид

$$\theta\,(x, z, 0) = \theta^{\text{off}}\,(x, z)\,, \tag{13}$$

а значение угла $\alpha = -1.57$.

На рис. 7 (кривые *1*, точечные линии) представлены результаты расчета эволюции угла $\theta(x, z = 0, \tau)$ к его равновесному распределению $\theta_{eq}(x, z = 0)$ вдоль оси $x \in [-10, 10]$, которое достигается спустя $\tau_R(\text{in}) = 10$ ($\sim 60\,\text{ms}$) единиц безразмерного времени после повторного включения электрического поля $\mathbf{E} = -E\hat{\mathbf{k}}$ ($E \sim 1.05\,\text{V}/\mu\text{m}$). Эти расчеты были получены для случая жесткого сцепления ЖК-молекул с ограничивающими поверхностями, при значении угла $\alpha = -1.57$

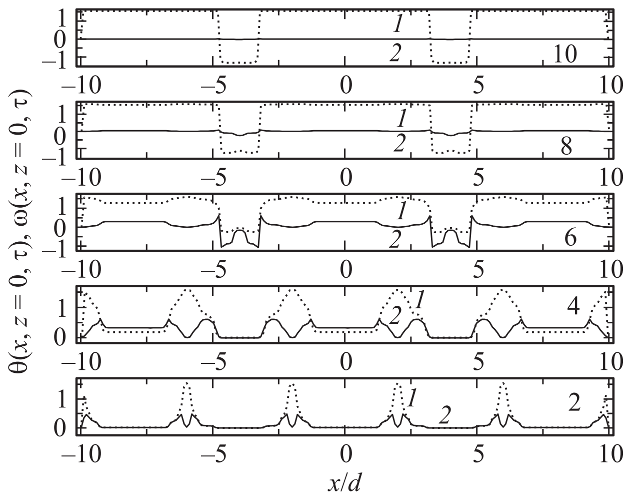

Рис. 7. Эволюция распределения угла $\theta(x, z = 0, \tau)$ (кривые *1*) и угловой скорости $\omega(x, z = 0, \tau)$ (кривые *2*) вдоль оси $x \in [-10, 10]$ к их равновесным распределениям $\theta_{eq}(x, z = 0, \tau = \tau_R(\text{in}) = 10)$ и $\omega_{eq}(x, z = 0, \tau = \tau_R(\text{in}) = 10)$ соответственно (случай A), под действием сильного электрического поля $\mathbf{E} = -E\hat{\mathbf{k}}$ ($E \sim 1.05\,\text{V}/\mu\text{m}$), направленного под углом $\alpha = -1.57$ ($\sim -89.96^\circ$) к горизонтальным ограничивающим поверхностям ЖК-канала. Промежуточные состояния соответствуют временам $\tau = 2$ ($\sim 12\,\text{ms}$), 4 ($\sim 24\,\text{ms}$), 6 ($\sim 36\,\text{ms}$), 8 ($\sim 48\,\text{ms}$) и 10 ($\sim 60\,\text{ms}$) после повторного включения электрического поля.

($\sim -89.96^\circ$). Промежуточные состояния соответствуют временам $\tau = 2$ ($\sim 12\,\text{ms}$), 4 ($\sim 24\,\text{ms}$), 6 ($\sim 36\,\text{ms}$), 8 ($\sim 48\,\text{ms}$) и 10 ($\sim 60\,\text{ms}$) соответственно. Здесь безразмерное время $\tau = \frac{\epsilon_0\epsilon_a}{\gamma_1}\left(\frac{U}{2d}\right)^2 t$ отсчитывалось с момента повторного включения электрического поля. В этом случае равновесное распределение угла $\theta_{eq}(x, z = 0)$ вдоль оси $x \in [-10, 10]$ характеризуется отчетливо выраженной квазипериодической структурой с узлами в точках $x = \pm 3.26$ и ± 4.72. Эволюция распределения безразмерной угловой скорости $\omega(x, z = 0, \tau)$ к ее равновесному распределению $\omega_{eq}(x, z = 0, \tau = \tau_R(\text{in})) = 0$, вдоль оси $x \in [-10, 10]$, представлена на рис. 7 (кривые *2*, сплошные линии). Промежуточные состояния соответствуют безразмерным временам $\tau = 2$ ($\sim 12\,\text{ms}$), $\tau = 4$ ($\sim 24\,\text{ms}$), $\tau = 6$ ($\sim 36\,\text{ms}$), $\tau = 8$ ($\sim 48\,\text{ms}$) и $\tau = \tau_R(\text{in}) = 10$ ($\sim 60\,\text{ms}$) соответственно. При этом отчетливо видно, как спустя 6 единиц безразмерного времени начинает формироваться в ЖК-канале несколько вихрей, причем положения узлов решетки задают границы формируемых вихрей. Так, согласно нашим расчетам, представленным на рис. 7 (кривые *2*), отчетливо наблюдаются три вихря ($-10 < x < -4.72$, $-3.26 < x < 3.26$ и $4.72 < x < 10$), вращающихся по часовой стрелке, и два вихря ($-4.72 < x < -3.26$ и $3.26 < x < 4.72$), вращающихся против часовой стрелки. Спустя время $\tau_R(\text{in}) = 10$ ($\sim 60\,\text{ms}$) вращение вихрей практически полностью прекратилось и установилось равновесное распределение поля директора вдоль оси

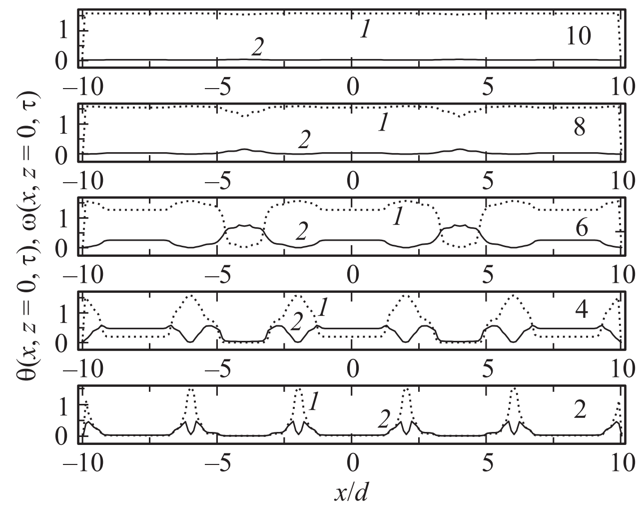

Рис. 8. То же, что на рис. 7, только для случая B.

$x \in [-10, 10]$, характеризующееся отчетливо выраженной квазипериодической структурой с узлами в точках $x = \pm 3.26$ и ± 4.72.

Иначе происходит процесс переориентации поля директора в случае B, когда директор переориентируется из положения $\hat{\mathbf{n}}^{\rm off}$ в направлении вектора $\mathbf{E}$, описываемого углом $\theta(x, z, \tau)$, под действием сильного электрического поля $\mathbf{E} = -E\hat{\mathbf{k}}$ ($E \sim 1.05\,\mathrm{V}/\mu\mathrm{m}$), включенного в момент времени $\tau = 250$, под углом $\alpha(\sim -\frac{\pi}{2})$ к горизонтальным ограничивающим поверхностям ЖК-канала. В этом случае электрическое поле $\mathbf{E}$ было выключено в течение $\tau\,(\mathrm{off}) = 250 - 20 = 230$ единиц безразмерного времени и начальное условие для угла θ определялось другой функцией $\theta^{\rm off}(x, z)$, которой соответствовала меньшая величина амплидуды $\theta_0^{\rm off}$ (см. уравнение (6)).

На рис. 8 (кривые *1*, точечные линии, и *2*, сплошные линии) представлены результаты расчета эволюции угла $\theta(x, z = 0, \tau)$ и безразмерной угловой скорости $\omega(x, z = 0, \tau)$ к их равновесным распределениям $\theta_{eq}(x, z = 0)$ и $\omega_{eq}(x, z = 0)$ вдоль оси $x \in [-10, 10]$ соответственно. Эти расчеты были получены для случая жесткого сцепления ЖК-молекул с ограничивающими поверхностями, при значении угла $\alpha = -1.57(\sim -89.96^\circ)$. Промежуточные состояния соответствуют временам $\tau = 2$ ($\sim 12\,\mathrm{ms}$), 4 ($\sim 24\,\mathrm{ms}$), 6 ($\sim 36\,\mathrm{ms}$), 8 ($\sim 48\,\mathrm{ms}$) и 10 ($\sim 60\,\mathrm{ms}$) соответственно. Следует отметить, что в обоих выше описанных случаях A и B, в течение первых 4ėдиниц безразмерного времени после повторного включения электрического поля, эволюция как угла $\theta(x, z = 0, \tau)$, так и безразмерной угловой скорости $\omega(x, z = 0, \tau)$ в точности повторяют друг друга. Различия в поведении как угла θ, так и угловой скорости ω начинаются с момента времени $\tau = 6$. Так, в случае B весь объем, занимаемый ЖК-фазой, вращается как единое целое, правда с различной угловой скоростью. Те домены, которые в случае A вращались против часовой стрелки, в случае B стали вращаться по часовой стрелке, правда с более высокой скоростью. К моменту времени $\tau_R(\mathrm{in}) = 10$ вращение ЖК-фазы, в обоих случаях A и B, полностью прекратилось, при том, что в случае B директор уже был равномерно сориентирован вдоль направления электрического поля $\mathbf{E}$ по всему объему, занимаемому ЖК-фазой.

Эволюция безразмерных сдвиговых компонент ТН $\sigma_{zx}(x, z = 0, \tau)$ и $\sigma_{xz}(x, z = 0, \tau)$ (см. рис. 9, *a* и *b*) и нормальной компоненты $\sigma_{xx}(x, z = 0, \tau)$ (см. рис. 10, *a*), к их равновесным значениям в трех точках, отстоящих на расстояниях $x = 2.0$ (кривая *1*), 3.0 (кривая *2*) и 3.2 (кривая *3*) от центра ЖК-канала, в течение первых 20 единиц безразмерного времени с момента повторного включения электрического поля

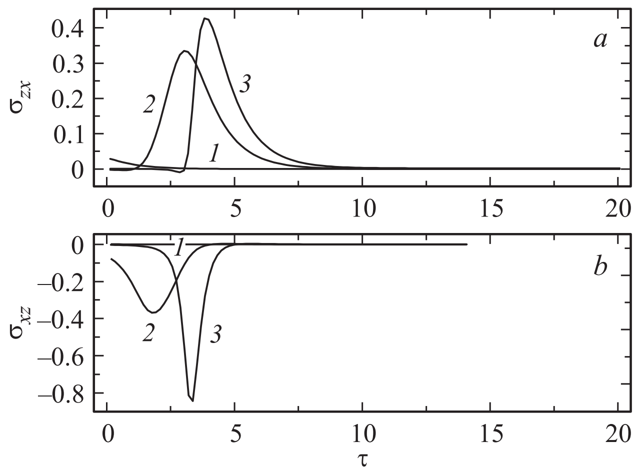

Рис. 9. Эволюция сдвиговых компонент ТН $\sigma_{zx}(x, z = 0, \tau)$ (*a*) и $\sigma_{xz}(x, z = 0, \tau)$ (*b*), в точках ($x = 2.0$) (кривые *1*), ($x = 3.0$) (кривые *2*) и ($x = 3.2$) (кривые *3*) соответственно, к их равновесным распределениям σ_{zx}^{eq} и σ_{xz}^{eq}, под действием сильного электрического поля $\mathbf{E} = -E\hat{\mathbf{k}}$ ($E \sim 1.05\,\mathrm{V}/\mu\mathrm{m}$), направленного под углом $\alpha = -1.57$ ($\sim -89.96^\circ$) к горизонтальным ограничивающим поверхностям ЖК-канала.

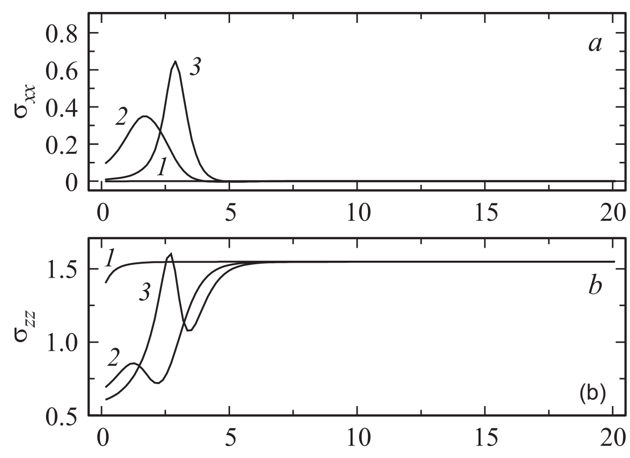

Рис. 10. То же, что на рис. 9, только для нормальных компонент ТН $\sigma_{xx}(x, z = 0, \tau)$ (*a*) и $\sigma_{zz}(x, z = 0, \tau)$ (*b*).

$\mathbf{E} = -E\hat{\mathbf{k}}$ ($E \sim 1.05\,\mathrm{V}/\mu\mathrm{m}$) (случай B) показаны на рис. 9 и 10. Расчеты свидетельствуют о том, что абсолютные величины двух сдвиговых компонент ТН $|\sigma_{xz}|$ и $|\sigma_{zx}|$, а также нормальной компоненты $|\sigma_{xx}|$, на начальном этапе эволюции, соответствующем временам $\tau \sim 3 \div 4$ ($\sim 18 \div 24\,\mathrm{ms}$), достигают максимальных значений $\sim 0.3 \div 0.8$ ($\sim 6.6 \div 17.6\,\mathrm{Pa}$), а затем быстро убывают к нулю. В свою очередь, безразмерная нормальная компонента ТН $\sigma_{zz}(x, z = 0, \tau)$ (рис. 10, b) на начальном этапе эволюции, соответствующем временам $\tau \sim 3 \div 4$ ($\sim 18 \div 24\,\mathrm{ms}$), осциллирует около значения ~ 1.0 ($\sim 20\,\mathrm{Pa}$), а затем монотонно возрастает и на конечном этапе эволюции давление растяжения σ_{zz}, обусловленное сильным электрическим полем $\mathbf{E} = -E\hat{\mathbf{k}}$ ($E \sim 1.05\,\mathrm{V}/\mu\mathrm{m}$), достигает величины $\sim 1.5(\sim 33\,\mathrm{Pa})$, сравнимым с величиной компоненты ТН σ_{zz} для случая поля $\mathbf{E} = E\hat{\mathbf{k}}$, направленного в противоположном направлении.

4. Заключение

В предлагаемой работе представлено численное исследование переориентации как поля директора $\hat{\mathbf{n}}$ и поля скорости $\mathbf{v}$, так и компонент тензора напряжения σ_{ij} ($ij = x, y, z$) нематического жидкого кристалла (ЖК), инкапсулированного в прямоугольный канал, под действием сильного электрического поля $\mathbf{E} = E\hat{\mathbf{k}}$, направленного под углом относительно нормали $\hat{\mathbf{k}}$, направленной к планарно ориентированному ЖК-каналу. Численные расчеты, выполненные в рамках нелинейного обобщения классической теории Эриксена–Лесли, показали, что при определенных соотношениях моментов и импульсов, действующих на единицу объема ЖК-фазы, и в случае $E \sim 1.05\,\mathrm{V}/\mu\mathrm{m}$ в процессе переориентации $\hat{\mathbf{n}}$ могут возникнуть переходные периодические структуры, если соответствующая мода искажения обладает наибыстрейшим откликом и, таким образом, подавляет все остальные моды, в том числе и однородные. Возникающие при этом вращающиеся домены способствовали уменьшению скорости диссипации энергии и, тем самым, создавали более выгодные, по сравнению с однородным поворотом, режимы переориентации поля директора. При этом были исследованы три динамических режима переориентации поля директора в нематике, образованном молекулами 4-n-пентил-4′-цианобифенила (5ЦБ), под действием сильного электрического поля $\mathbf{E} = E\hat{\mathbf{k}}$. Первый режим соответствовал включению $\mathbf{E}$, направленному в положительном направлении, перпендикулярно однородно ориентированному нематику, второй соответствовал режиму с выключенным полем, $\mathbf{E} = 0$, и наконец, третий режим соответствовал повторному включению $\mathbf{E}$, но направленному в отрицательном направлении относительно нормали к планарно ориентированному ЖК-каналу.

Мы полагаем, что данная работа проливает свет на неизученные аспекты динамики переориентации поля директора в микроскопических ЖК-каналах под действием сильного электрического поля.

Приложение. Моменты и компоненты тензора напряжений

Мы рассмотрим нематический ЖК, где поле директора задано вектором $\hat{\mathbf{n}} = (n_x, 0, n_z) = (\cos\theta, 0, \sin\theta)$, а баланс вращательных моментов, действующих на единицу объема ЖК-фазы, состоит из [7,10] $\mathbf{T}_{\text{elast}} = T_{\text{elast}}\hat{\mathbf{j}} = \frac{\delta \mathscr{W}_{\text{F}}}{\delta \hat{\mathbf{n}}} \times \hat{\mathbf{n}}$ — упругого, $\mathbf{T}_{\text{vis}} = T_{\text{vis}}\hat{\mathbf{j}} = \frac{\delta \mathscr{R}^{\text{vis}}}{\delta \hat{\mathbf{n}}_t} \times \hat{\mathbf{n}}$ — вязкого и $\mathbf{T}_{\text{el}} = T_{\text{el}}\hat{\mathbf{j}} = \frac{\delta \psi_{\text{el}}}{\delta \hat{\mathbf{n}}} \times \hat{\mathbf{n}}$ — электрического вкладов. Здесь $\mathscr{W}_{\text{F}} = \frac{1}{2}\left[K_1 (\nabla \cdot \hat{\mathbf{n}})^2 + K_3 (\hat{\mathbf{n}} \times \nabla \times \hat{\mathbf{n}})^2\right]$ — плотность упругой энергии, приходящейся на единицу объема ЖК-фазы, $\psi_{el} = -\frac{1}{2}\,\epsilon_0\epsilon_a\,(\hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{E})^2$ — плотность электрической энергии,

$$\mathscr{R}^{\text{vis}} = \alpha_1\big(\hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{D}_s \cdot \hat{\mathbf{n}}\big)^2 + \gamma_1\big(\hat{\mathbf{n}}_{\text{t}} - \mathbf{D}_a \cdot \hat{\mathbf{n}}\big)^2 + 2\gamma_2\big(\hat{\mathbf{n}}_{\text{t}} - \mathbf{D}_a \cdot \hat{\mathbf{n}}\big) \cdot \big(\mathbf{D}_s \cdot \hat{\mathbf{n}} - (\hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{D}_s \cdot \hat{\mathbf{n}})\,\hat{\mathbf{n}}\big) + \alpha_4 \mathbf{D}_s : \mathbf{D}_s + (\alpha_5 + \alpha_6)\,(\hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{D}_s \cdot \mathbf{D}_s \cdot \hat{\mathbf{n}})$$

— вязкий вклад в полную функцию Рэлея $\mathscr{R} = \mathscr{R}^{\text{vis}}$. Здесь K_1 и K_3 — коэффициенты упругости Франка, соответствующие поперечному и продольному изгибам, $\mathbf{D}_s = \frac{1}{2}\left[\nabla\mathbf{v} + (\nabla\mathbf{v})^{\text{T}}\right]$ и $\mathbf{D}_a = \frac{1}{2}\left[\nabla\mathbf{v} - (\nabla\mathbf{v})^{\text{T}}\right]$ — симметричный и антисимметричный вклады в тензор $\nabla\mathbf{v}$, $\hat{\mathbf{n}}_t = \frac{d\hat{\mathbf{n}}}{dt}$ — материальная производная, $\alpha_i (i = 1, \ldots, 6)$ — коэффициенты вязкости Лесли, а $\gamma_1 = \alpha_3 - \alpha_2$, $\gamma_2 = \alpha_3 + \alpha_2$ — коэффициенты вращательной вязкости.

Безразмерный тензор напряжений (ТН) представляет собой сумму, состоящую из упругих (σ^{elast}), вязких (σ^{vis}) и электрических (σ^{el}) вкладов за вычетом $P\mathscr{L}$. Компоненты упругого ТН имеют вид

$$\sigma_{xx}^{\text{elast}} = \delta_1\left(-\Delta_1\theta_{,x}^2 + \Delta_3\theta_{,x}\theta_{,z}\right),$$

$$\sigma_{zz}^{\text{elast}} = \delta_1\left(-\Delta_2\theta_{,z}^2 + \Delta_3\theta_{,x}\theta_{,z}\right),$$

$$\sigma_{xz}^{\text{elast}} = \delta_1\left(-\Delta_1\theta_{,x}\theta_{,z} + \Delta_3\theta_{,z}^2\right),$$

$$\sigma_{zx}^{\text{elast}} = \delta_1\left(\Delta_2\theta_{,x}\theta_{,z} + \Delta_3\theta_{,x}^2\right),$$

где

$$\Delta_1 = \sin^2\theta + K_{31}\cos^2\theta, \quad \Delta_2 = \cos^2\theta + K_{31}\sin^2\theta,$$

$$\Delta_3 = \frac{1 - K_{31}}{2}\sin 2\theta, \quad K_{31} = K_3/K_1.$$

Безразмерные компоненты вязкого ТН имеют вид:

$$\sigma_{ij}^{\text{vis}} = f_{ij}^{1,\text{vis}}\psi_{,xx} + f_{ij}^{2,\text{vis}}\psi_{,zz} + f_{ij}^{3,\text{vis}}\psi_{,xz} + f_{ij}^{4,\text{vis}}\psi_{,zx},$$

где
$$f_{xx}^{1,\mathrm{vis}} = -\frac{\sin 2\theta}{4}\left(\frac{2\alpha_1}{\gamma_1} + \gamma^2 \cos 2\theta\right),$$
$$f_{xx}^{2,\mathrm{vis}} = -f_{xx}^{1,\mathrm{vis}},$$
$$f_{xx}^{3,\mathrm{vis}} = \frac{1}{\gamma_1}\left[\alpha_1 \cos 2\theta \cos^2\theta + (\alpha_5 + \alpha_6)\cos^2\theta + \alpha_4\right]$$
$$- \frac{\gamma^2}{4}\sin^2\theta,$$
$$f_{xx}^{4,\mathrm{vis}} = -\frac{\gamma}{2}\Big[\sin 2\theta(\Delta_1\theta_{,xx} + \Delta_2\theta_{,zz})$$
$$+ \Delta_5(\theta_{,x}^2 + 2\theta_{,xz} - \theta_{,z}^2 - 2\theta_{,x}\theta_{,z})\Big],$$
$$f_{zz}^{1,\mathrm{vis}} = -\frac{\sin 2\theta}{4}\left(2\frac{\alpha_1}{\gamma_1}\cos^2\theta - \gamma^2 \cos 2\theta\right),$$
$$f_{zz}^{2,\mathrm{vis}} = -f_{zz}^{1,\mathrm{vis}},$$
$$f_{zz}^{3,\mathrm{vis}} = \frac{1}{\gamma_1}\Big[\alpha_1 \cos 2\theta \sin^2\theta - (\alpha_5 + \alpha_6)\cos^2\theta - \alpha_4\Big]$$
$$+ \frac{\gamma^2}{4}\sin^2\theta, \quad f_{zz}^{4,\mathrm{vis}} = -f_{xx}^{4,\mathrm{vis}},$$
$$f_{xz}^{1,\mathrm{vis}} = \frac{1}{4\gamma_1}\big(-\alpha_1\sin^2 2\theta + 2\gamma_2\cos 2\theta - 2\alpha_4$$
$$- \alpha_5 - \alpha_6 - \gamma_1\big) + \Delta_6^2,$$
$$f_{xz}^{2,\mathrm{vis}} = \frac{1}{4\gamma_1}\Big(\alpha_1\sin^2 2\theta + 2\alpha_4 + \alpha_5 + \alpha_6 - \gamma_1\Big) + \Delta_7,$$
$$f_{xz}^{3,\mathrm{vis}} = -\frac{\sin 4\theta}{4}\left(\frac{\alpha_1}{\gamma_1} + \gamma^2\right),$$
$$f_{xz}^{4,\mathrm{vis}} = -\Delta_6\left(\Delta_1\theta_{,xx} + \Delta_2\theta_{,zz}\right)$$
$$- \Delta_3\Delta_6\left(\theta_{,x}^2 + 2\theta_{,xz} - \theta_{,z}^2 - 2\theta_{,x}\theta_{,z}\right),$$
$$f_{zx}^{1,\mathrm{vis}} = -\frac{1}{4\gamma_1}\Big(\alpha_1\sin^2 2\theta + 2\alpha_4 + \alpha_5 + \alpha_6 - \gamma_1\Big) + \Delta_6^2,$$
$$f_{zx}^{2,\mathrm{vis}} = \frac{1}{4\gamma_1}\big(\alpha_1\sin^2 2\theta + 2\gamma_2\cos 2\theta + 2\alpha_4$$
$$+ \alpha_5 + \alpha_6 + \gamma_1\big) - \Delta_8^2, \quad f_{zx}^{3,\mathrm{vis}} = -f_{xz}^{3,\mathrm{vis}},$$
$$f_{zx}^{4,\mathrm{vis}} = \Delta_8(\Delta_1\theta_{,xx} + \Delta_2\theta_{,zz})$$
$$+ \Delta_8\Delta_3(\theta_{,x}^2 + 2\theta_{,xz} - \theta_{,z}^2 - 2\theta_{,x}\theta_{,z}),$$
где
$$\Delta_5 = \frac{1 - K_{31}}{2}\sin^2 2\theta, \quad \Delta_6 = \frac{1}{2}\left(1 - \gamma\cos 2\theta\right),$$
$$\Delta_7 = \frac{1}{4}\left(1 - \gamma^2\cos^2 2\theta\right), \quad \Delta_8 = \frac{1}{2}\left(1 + \gamma\cos 2\theta\right).$$

Безразмерный аналог уравнения Навье–Стокса $\rho\,\frac{d\mathrm{v}}{dt} = \nabla\cdot\sigma$ принимает вид
$$\delta_2\left[(\Delta\psi)_{,\tau} + \psi_{,z}(\Delta\psi)_{,x} - \psi_{,x}(\Delta\psi)_{,z}\right] = \hat{\mathscr{L}}\psi + \mathscr{F},$$
где $\Delta\psi = \psi_{,xx} + \psi_{,zz}$, $\mathscr{F} = \mathscr{F}_{\mathrm{elast}} + \mathscr{F}_{\mathrm{el}}$, а
$$\mathscr{F}_{\mathrm{elast}} = (\sigma_{xx}^{\mathrm{elast}} + \sigma_{zz}^{\mathrm{elast}})_{,xz} + (\sigma_{zx}^{\mathrm{elast}})_{,zz} - (\sigma_{xz}^{\mathrm{elast}})_{,xx},$$
$$\mathscr{F}_{\mathrm{el}} = -(\sigma_{zz}^{\mathrm{el}})_{,xz},$$
и
$$\sigma_{zz}^{\mathrm{el}} = \bar{E}^2\sin\alpha\left(\frac{\epsilon_\perp}{\epsilon_a} + \sin^2\theta\right).$$

Оператор
$$\hat{\mathscr{L}}\psi = a_1\psi_{,zzzz} + a_2\psi_{,xzzz} + a_3\psi_{,xxzz} + a_4\psi_{,xxxz}$$
$$+ a_5\psi_{,xxxx} + a_6\psi_{,zzz} + a_7\psi_{,xzz} + a_8\psi_{,xxz}$$
$$+ a_9\psi_{,xxx} + a_{10}\psi_{,zz} + a_{11}\psi_{,xz} + a_{12}\psi_{,xx},$$
где
$$a_1 = f_{zx}^{2,\mathrm{vis}}, \quad a_2 = f_{zx}^{3,\mathrm{vis}} + f_{xx}^{2,\mathrm{vis}} - f_{zz}^{2,\mathrm{vis}},$$
$$a_3 = f_{zx}^{1,\mathrm{vis}} - f_{xz}^{2,\mathrm{vis}} + f_{xx}^{3,\mathrm{vis}} - f_{zz}^{3,\mathrm{vis}},$$
$$a_4 = f_{xx}^{1,\mathrm{vis}} - f_{zz}^{1,\mathrm{vis}} - f_{xz}^{3,\mathrm{vis}},$$
$$a_5 = -f_{xz}^{1,\mathrm{vis}}, \quad a_6 = f_{xx,z}^{2,\mathrm{vis}} - f_{zz,z}^{2,\mathrm{vis}} + 2f_{zx,z}^{2,\mathrm{vis}},$$
$$a_7 = f_{xx,z}^{2,\mathrm{vis}} - f_{zz,z}^{2,\mathrm{vis}} + f_{xx,x}^{3,\mathrm{vis}} - f_{zz,z}^{3,\mathrm{vis}} + 2f_{zx,z}^{3,\mathrm{vis}} - 2f_{xz,x}^{3,\mathrm{vis}},$$
$$a_8 = f_{xx,x}^{1,\mathrm{vis}} - f_{zz,x}^{1,\mathrm{vis}} + f_{xx,z}^{3,\mathrm{vis}} - f_{zz,z}^{3,\mathrm{vis}} + 2f_{zx,z}^{1,\mathrm{vis}} - 2f_{xz,x}^{3,\mathrm{vis}},$$
$$a_9 = f_{xx,z}^{1,\mathrm{vis}} - f_{zz,z}^{1,\mathrm{vis}} - 2f_{xz,x}^{1,\mathrm{vis}},$$
$$a_{10} = f_{xx,xz}^{2,\mathrm{vis}} - f_{zz,xz}^{2,\mathrm{vis}} + f_{zx,zz}^{2,\mathrm{vis}} - f_{xz,xx}^{2,\mathrm{vis}},$$
$$a_{11} = f_{xx,xz}^{3,\mathrm{vis}} - f_{zz,xz}^{3,\mathrm{vis}} + f_{zx,zz}^{3,\mathrm{vis}} - f_{xz,xx}^{3,\mathrm{vis}},$$
$$a_{12} = f_{xx,xz}^{1,\mathrm{vis}} - f_{zz,xz}^{1,\mathrm{vis}} + f_{zx,zz}^{1,\mathrm{vis}} - f_{xz,xx}^{1,\mathrm{vis}}.$$

Список литературы

[1] S. Lee, R. An, J.A. Hunt. Nature Nanotech. **5**, 412 (2010).
[2] S. Samitsu, Y. Takanishi, J. Yamamoto. Nature Mater. **9**, 816 (2010).
[3] H. Ren, Su Xu, S-T. Wu. Lab. Chip. **13**, 100 (2013).
[4] R. Daugla, S. Cagri Kayi, Ch.N. Baroud. Proc. Natl. Acad. Sci. **110**, 853 (2013).
[5] P.G. de Gennes, J. Prost. The physics of liquid crystals. Oxford Univ. Press. Oxford (1995). 400 p.
[6] A. Sugimura, A.V. Zakharov. Phys. Rev. E **84**, 021703 (2011).
[7] A.A. Vakulenko, A.V. Zakharov. Phys. Rev. E **88**, 022505 (2013).
[8] J.L. Ericksen. Arch. Ration. Mech. Anal. **4**, 231 (1960).
[9] F.M. Leslie. Arch. Ration. Mech. Anal. **28**, 265 (1968).
[10] А.В. Захаров, А.А. Вакуленко, С.В. Пасечник. ФТТ **58**, 1851 (2016).
[11] И.С. Березин, Н.Р. Жидков. Методы вычислений. Физматгиз, М. (1964). 464 с.