Сдвиговый поток нематического жидкого кристалла вблизи заряженной поверхности

© А.В. Захаров, А.А. Вакуленко

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

(Поступила в Редакцию 30 мая 2002 г.
В окончательной редакции 21 октября 2002 г.)

Для полярных жидких кристаллов, таких как 4-n-октилокси-4′-цианобифенил, вблизи ограничивающих заряженных поверхностей исследованы угол предельной ориентации θ_{eff} и коэффициент эффективной вращательной вязкости γ_i^{eff}. Величины θ_{eff} и γ_1^{eff} рассчитаны в рамках теории Эриксона–Лесли. В случае гомеотропной ориентации молекул на заряженных поверхностях оловянной окиси индия результаты расчетов показали, что увеличение γ_i^{eff} может составить до 7.8% от объемного значения γ_1.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант № 01-03-32084) и Фонда по естественным наукам (грант № E00-5.0-154).

В сдвиговом ламинарном потоке нематического жидкого кристалла (НЖК) между двумя ограничивающими поверхностями одним из главных факторов, влияющих на ориентацию поля директора $\mathbf{n}(\mathbf{r})$, является поле скоростей этого потока $\mathbf{v}(\mathbf{r})$. Гидродинамика НЖК в объеме, когда влиянием ограничивающих поверхностей можно пренебречь, описана в рамках классической теории Эриксона–Лесли, учитывающей взаимодействие полей $\mathbf{n}(\mathbf{r})$ и $\mathbf{v}(\mathbf{r})$. В случае течения Куэтта между двумя плоскими параллельными поверхностями, когда одна поверхность (нижняя) неподвижна, а вторая (верхняя) смещается с постоянной скоростью $\mathbf{v}$, профиль поля скоростей принимает вид $\mathbf{v}(\mathbf{r}) = v(y)i$, где направление оси x совпадает с направлением единичного вектора $\mathbf{i}$, ориентированного параллельно ограничивающим поверхностям, а ось y направлена вдоль единичного вектора $\mathbf{j}$ перпендикулярно ограничивающим поверхностям. При больших скоростях потока равновесный угол θ_{bulk} между векторами $\mathbf{n}$ и $\mathbf{v}$ может быть определен из условия равенства нулю гидродинамических моментов, действующих на элементарный объем нематика [1,2] $T_{\text{vis}} = (1/2)(\gamma_1 + \gamma_2 \cos\theta_{\text{bulk}})\dot{\gamma}$, как

$$\theta_{\text{bulk}} = \frac{1}{2}\cos^{-1}(1/\lambda), \qquad (1)$$

где $\lambda = -\gamma_2/\gamma_1$, γ_1 и γ_2 — коэффициенты вращательной вязкости (КВВ) нематика, а $\dot{\gamma} = \partial v(y)/\partial y$ — скорость деформации. Однако вблизи заряженных ограничивающих поверхностей при гидродинамическом описании таких анизотропных систем как жидкие кристаллы необходимо учитывать влияние упругих и поверхностных сил, проникающих в среду на глубину ξ. Поскольку эти силы вносят дополнительный вклад в баланс моментов, действующих на элементарный объем нематика, они влияют как на величину угла θ_{bulk}, так и на КВВ $\gamma_i (i = 1, 2)$. При этом поверхностные силы ответственны за сцепление молекул нематика с поверхностью, а величина поверхностной энергии сцепления может быть записана в виде [3]

$$f_0 = -\frac{1}{2}\omega_0(\mathbf{n}_s \cdot \mathbf{n}_0)^2 = -\frac{1}{2}\omega_0\cos^2(\theta_s - \theta_0), \qquad (2)$$

где ω_0 — коэффициент сцепления, имеющий размерность поверхностной плотности энергии, θ_s и θ_0 — углы между векторами $\mathbf{n}_s$ и $\mathbf{n}_0$ и векторами $\mathbf{n}_s$ и $\mathbf{v}$ соответственно. Здесь $\mathbf{n}_s$ — ориентация директора $\mathbf{n}$ на ограничивающей поверхности, а $\mathbf{n}_0$ — единичный вектор, совпадающий с направлением оси легкого ориентирования [3] и отражающий анизотропию поверхностной структуры. Поверхностная энергия f_0 локализована в узком приповерхностном слое толщиной $\lambda_s \sim 10-100$ nm [4]. На этих расстояниях нематический параметр порядка меняется от значений на поверхности до объемных. В случае контакта твердой ограничивающей поверхности с нематиком имеет место явление селективности ионов, присутствующих в нематической фазе. Так, если на поверхности образуется отрицательный заряд плотностью σ, положительные ионы притягиваются, а отрицательные отталкиваются. Если число положительных ионов N_+ равно числу отрицательных ионов N_-, глубина проникновения электрического поля $\mathbf{E}(y)$, создаваемого поверхностной плотностью заряда σ, равна радиусу Дебая λ_D [5] (случай слабого электролита), а пространственная зависимость этого электрического поля в случае объемной экранировки может быть записана как

$$\mathbf{E}(y) = E_0 \exp(-y/\lambda_D)\mathbf{j}, \qquad (3)$$

где $E_0 = \sigma/\epsilon_0\overline{\epsilon}$ — электрическое поле заряженной поверхности, ϵ_0 — диэлектрическая проницаемость вакуума, $\overline{\epsilon} = (\epsilon_{\parallel} + 2\epsilon_{\perp})/3$ — средняя диэлектрическая проницаемость, $\epsilon_{\parallel}$ и $\epsilon_{\perp}$ — диэлектрические проницаемости в направлении, параллельном и перпендикулярном направлению директора $\mathbf{n}$.

В настоящей статье в рамках теории Эриксона–Лесли [1,2], сделана попытка ответить на вопрос о том, как величина плотности поверхностного заряда σ на расстояниях ξ влияет на величину угла $\theta_{\text{eff}}(y)$ и КВВ γ_1^{eff}. Поскольку экспериментаторы при измерении указанных величин вблизи ограничивающих поверхностей [6] сталкиваются с трудностями, теоретические расчеты $\theta_{\text{eff}}(y)$ и γ_1^{eff} несомненно представляют большую ценность. Основные результаты гидродинамики НЖК вблизи ограничивающих заряженых поверхностей изложены в разд. 1. Результаты расчетов $\theta_{\text{eff}}(y)$ и КВВ γ_1^{eff} — в разд. 2.

1. Основные результаты гидродинамической теории нематиков вблизи заряженной поверхности

Классический подход к описанию вязкости НЖК в рамках теории Эриксона–Лесли подразумевает существование векторного поля директора $\mathbf{n}(\mathbf{r}, t)$, представляющего собой поле направлений преимущественной ориентации молекул в окрестностях точек $\mathbf{r}$. Эта ориентация может меняться от точки к точке. В приближении несжимаемости среды ($\boldsymbol{\nabla}\cdot\mathbf{v}=0$) выражения для баланса количества движения и моментов, действующих на элементарный объем, принимают следующий вид [1,2]:

$$\rho\,\frac{d\mathbf{v}}{dt} = \boldsymbol{\nabla}\cdot\bar{\sigma}, \tag{4}$$

$$\mathbf{T}_{\text{vis}} + \mathbf{T}_{\text{el}} + \mathbf{T}_{\text{elast}} = 0, \tag{5}$$

где $\rho = N/V$ — плотность числа частиц, $\bar{\sigma}$ — тензор деформаций с компонентами [2]

$$\bar{\sigma}_{ij} = \alpha_1 n_l n_m M_{lm} n_i n_j + \alpha_2 n_i N_j + \alpha_3 N_i n_j + \alpha_4 M_{ij} + \alpha_5 n_i n_l M_{lj} + \alpha_6 M_{im} n_m n_j, \tag{6}$$

где

$$N_m = \frac{dn_m}{dt} + \frac{1}{2}\,(v_{m,k} - v_{k,m})n_k,$$
$$M_{ij} = \frac{1}{2}\,(v_{i,j} + v_{j,i}). \tag{7}$$

В выражении (7) $M_{i,j}$ — компоненты симметричной части тензора Эйлера, антисимметричная часть которого (W) входит в кинетику директора (компоненты вектора $\mathbf{N}$) в виде свертки $W\cdot\mathbf{n}$, образуя вектор с компонентами $(1/2)(v_{m,k} - v_{k,m})n_k$, $(m = 1, 2, 3)$; материальные производные компонент вектора $\mathbf{n}$ равны $\frac{dn_m}{dt} = \frac{\partial n_m}{\partial t} + v_l n_{m,l}$.

Коэффициенты Лесли α_i $(i = 1, 2, \ldots 6)$ удовлетворяют соотношению Онзагера–Пароди $\alpha_2 + \alpha_3 = \alpha_6 - \alpha_5$, и, таким образом, только пять из шести коэффициентов α_i независимы, а коэффициенты вращательной вязкости γ_i $(i = 1, 2)$ связаны с α_i соотношениями $\gamma_1 = \alpha_3 - \alpha_2$ и $\gamma_2 = \alpha_6 - \alpha_5$. Вращающий момент относительно директора, вызванный гидродинамическими силами, имеет вид

$$\mathbf{T}_{\text{vis}} = -\mathbf{n}\times(\gamma_1\mathbf{N} + \gamma_2\mathbf{M}\cdot\mathbf{n}), \tag{8}$$

электрическими силами —

$$\mathbf{T}_{\text{el}} = (\epsilon_a/\epsilon_0)\mathbf{n}\times\mathbf{E}(\mathbf{E}\cdot\mathbf{n}), \tag{9}$$

упругими силами —

$$\mathbf{T}_{\text{elast}} = \mathbf{n}\times\mathbf{h}, \tag{10}$$

где вектор $\mathbf{N}$ имеет компоненты, заданные в выражении (7), $M\cdot\mathbf{n}$ — свертка симметричной части тензора Эйлера M с вектором $\mathbf{n}$, представляющая собой вектор с компонентами $(v_{i,j} + v_{j,i})n_j/2$ $(i = 1, 2, 3)$. Вектор $\mathbf{h} = \mathbf{h}_s + \mathbf{h}_t + \mathbf{h}_b$ задает молекулярное поле в деформированном НЖК, связанное с градиентами директора $\mathbf{n}$ [3], $\mathbf{h}_s = K_1\boldsymbol{\nabla}(\boldsymbol{\nabla}\cdot\mathbf{n})$, $\mathbf{h}_t = -K_2[(\mathbf{n}\cdot\mathbf{l})\mathbf{l} + \boldsymbol{\nabla}\times(\mathbf{n}\cdot\mathbf{l})\mathbf{n}]$, $\mathbf{h}_b = K_3[\mathbf{n}\times\mathbf{l}\times\mathbf{l} + \boldsymbol{\nabla}\times(\mathbf{n}\times(\mathbf{n}\times\mathbf{l}))]$ и $\mathbf{l} = \boldsymbol{\nabla}\times\mathbf{n}$. Коэффициенты упругости Франка K_i $(i = 1, 2, 3)$ описывают три типа деформаций НЖК — поперечного изгиба, кручения и продольного изгиба соответственно, $\epsilon_a = \epsilon_\parallel - \epsilon_\perp$ — коэффициент диэлектрической анизотропии нематика.

В случае течения Куэтта для плоской геометрии выражения для векторов $\mathbf{v}(\mathbf{r})$ и $\mathbf{n}(\mathbf{r})$ принимают вид $\mathbf{v} = (v(y), 0, 0)$, $\mathbf{n} = (\cos\theta_{\text{eff}}, \sin\theta_{\text{eff}}, 0)$. Уравнение (5) с учетом единственной ненулевой компоненты градиента поля скорости $\dot{\gamma} = \partial v(y)/\partial y$ преобразуется к виду [6]

$$\frac{\partial\theta_{\text{eff}}}{\partial\tau} + \frac{1}{2}\,[1 + (\gamma_2/\gamma_1)\cos 2\theta_{\text{eff}}] - \frac{1}{2}\sin 2\theta_{\text{eff}}\overline{B}^2 - h(\theta_{\text{eff}})\,\frac{\partial^2\theta_{\text{eff}}}{\partial\bar{y}^2} - \frac{1}{2}\,h'(\theta_{\text{eff}})\left(\frac{\partial\theta_{\text{eff}}}{\partial\bar{y}}\right)^2 = 0, \tag{11}$$

где $\overline{B}^2 = B^2/\gamma_1\dot{\gamma} = \epsilon_a\sigma^2/(\bar{\epsilon}^2\epsilon_0^3\gamma_1\dot{\gamma})\exp(-2\bar{y})$, $\bar{y} = y/\lambda_D$ и $\tau = t\dot{\gamma}$ — безразмерные координата и время, $h(\theta_{\text{eff}}) = (K_1\cos^2\theta_{\text{eff}} + K_3\sin^2\theta_{\text{eff}})/(\gamma_1\dot{\gamma}\lambda_D^2)$, $h'(\theta_{\text{eff}})$ есть производная функции $h(\theta_{\text{eff}})$ относительно θ_{eff}. В случае больших скоростей деформаций ориентация директора определяется балансом только гидродинамических сил, а влияние электрических сил простирается лишь на глубину $0 \le \xi \le 3\,\mu$m [6]. Так, для 4-*n*-октилокси-4′-цианобифенила (8ОЦБ) при $\dot{\gamma} = 800\,\text{s}^{-1}$ и $\sigma = 10^{-3}\,\text{C/m}^2$, $|T_{\text{elast}}| \sim 0.5\,\text{N/m}^2$, $|T_{\text{vis}}| \sim 4.0\,\text{N/m}^2$, $|T_{\text{el}}(y = 0.1\,\mu\text{m})| \sim 212\,\text{N/m}^2$, $|T_{\text{el}}(y = 1\,\mu\text{m})| \sim 0.2\,\text{N/m}^2$. Принимая во внимание тот факт, что $\Delta = |T_{\text{elast}}|/|T_{\text{vis}}| \sim 0.125$, вкладом упругих сил в баланс моментов можно пренебречь, во всяком случае, для скоростей деформаций $\dot{\gamma} \geqslant 800\,\text{s}^{-1}$.

Таким образом, уравнение (11) можно переписать в виде

$$\frac{\partial\theta_{\text{eff}}}{\partial\tau} + \frac{1}{2}\,[1 + (\gamma_2/\gamma_1)\cos 2\theta_{\text{eff}}] - \frac{1}{2}\,\sin 2\theta_{\text{eff}}\overline{B}^2 = 0. \tag{12}$$

Для стационарного сдвигового потока Куэтта и произвольных скоростей деформаций $\dot{\gamma}$ уравнение (11) может быть записано в виде

$$\frac{\partial^2\theta_{\text{eff}}(\bar{y})}{\partial\bar{y}^2} - A\exp(-2\bar{y})\theta_{\text{eff}}(\bar{y}) + D = 0, \tag{13}$$

где $A = \epsilon_a\sigma^2\lambda_D^2/\bar{\epsilon}^2 K_1$, $D = (\gamma_1 + \gamma_2)\dot{\gamma}\lambda_D^2/2K_1$.

Уравнение (13) записано с учетом того, что в уравнении (11) последним слагаемым можно пренебречь в сравнении с остальными членами, поскольку величина угла $\theta_{\text{eff}} \leq 14°(|\theta_{\text{eff}}| < 0.18)$ для всех жидких кристаллов [3,6], а $\theta''_{\text{eff}}(\bar{y}) \approx 0.01$. Граничные условия для уравнения (13) следующие: $\theta_{\text{eff}}(\bar{y}) = 0$ и $\theta'_{\text{eff}}(\bar{y}) = 0$ при $\bar{y} = \bar{y}_a = \lambda_s/\lambda_D$ и $\theta_{\text{eff}}(\bar{y}) = \theta_{\text{bulk}}$ и $\theta'_{\text{eff}}(\bar{y}) = 0$ при $\bar{y} = \bar{y}_b$. Далее будет показано, что в случае молекул 8ОЦБ при температуре 340 K и гомеотропной ориентации нематика на ограничивающей поверхности оловянной окиси индия $\sigma = 10^{-3}\,\text{C/m}^2$, $\lambda_D = 0.545\,\mu\text{m}$. Теоретические вычисления, выполненные в рамках статистико-механической теории [4], показывают, что выбор величины $\lambda_s \sim 0.1\,\mu\text{m}$ для молекул 8ОЦБ вблизи поверхностей оловянной окиси индия является вполне разумным. Все это позволяет определить границы интервала: $\bar{y}_a = 0.18$ и $\bar{y}_b = 5.5$ соответственно. Уравнение (13) без последнего слагаемого D допускает асимптотическое решение в случае $|A| \gg 1$ в виде [7]

$$\theta_{\text{eff}}(\bar{y}) = q^{1/4} \exp\left(\pm i\delta \int_0^{\bar{y}} q^{1/2} d\bar{y}\right) [1 + O(\delta^{-1})], \quad (14)$$

где $q = \exp(-2\bar{y})$ и $\delta = i\sqrt{A}$. В случае НЖК 8ОЦБ при $\sigma = 10^{-3}\,\text{C/m}^2$ $A \simeq 37.71$, а последним слагаемым в уравнении (13) можно пренебречь, поскольку $D \simeq 0.004$. Тогда асимптотическое решение уравнения (13) с учетом граничных условий принимает вид

$$\theta_{\text{eff}}(\bar{y}) = C_1 \exp[\bar{y}/2 + \sqrt{A}\big(\exp(-\bar{y})\big) - 1] + C_2 \exp[\bar{y}/2 - \sqrt{A}\big(\exp(-\bar{y}) - 1\big)], \quad (15)$$

где $C_i = \theta_{\text{bulk}}\beta_i/\beta$ $(i = 1, 2)$, $\beta = \beta_2\beta_3 - \beta_1\beta_4$, $\beta_1 = \exp[\bar{y}_a/2 - \sqrt{A}\big(\exp-(\bar{y}_a) - 1\big)]$, $\beta_2 = \exp[\bar{y}_a/2 + \sqrt{A}\big(\exp(-\bar{y}_a) - 1\big)]$, $\beta_3 = \exp[\bar{y}_b/2 - \sqrt{A}\big(\exp(-\bar{y}_b) - 1\big)]$, $\beta_4 = \exp[\bar{y}_b/2 + \sqrt{A} \times \big(\exp(-\bar{y}_b) - 1\big)]$.

В случае больших скоростей деформаций $(\dot{\gamma} \geq 800\,\text{s}^{-1})$ уравнение (11) вблизи ограничивающей заряженной поверхности принимает вид

$$\dot{\gamma}[\gamma_1 + \gamma_2 \cos 2\theta_{\text{eff}}] = B^2 \sin 2\theta_{\text{eff}}, \quad (16)$$

а выражение для θ_{eff} может быть записано следующим образом:

$$\theta_{\text{eff}} = \frac{1}{2}\cos^{-1}(1/\lambda_{\text{eff}}) = \frac{1}{2}\cos^{-1} C, \quad (17)$$

где $C = \lambda_{\text{eff}}^{-1} = \alpha_0\kappa\big[1 \pm \big(1 + (\bar{B}^4 - 1)\kappa^{-1}\big)^{1/2}\big]$, $\alpha_0 = \lambda^{-1} = -\gamma_1/\gamma_2$, $\kappa = 1 + \alpha_0^2\bar{B}^4$.

Согласно теории, предложенной в [8], коэффициент вращательной вязкости может быть представлен в виде

$$\gamma_1 = (2f/\lambda)\overline{P}_2, \quad (18)$$

где $\overline{P}_2$ — нематический параметр порядка (усредненный по ориентациям молекул полином Лежандра второго ранга [8]), $f = \rho k_B T\ p/D_\perp$, $D_\perp$ — коэффициент вращательной вязкости относительно коротких осей молекул НЖК, k_B — постоянная Больцмана, $p = (a^2-1)/(a^2+1)$, $a = \sigma_\parallel/\sigma_\perp$ — геометрический параметр, связанный с размерами молекул, образующих нематик, и имеющий смысл отношения длины молекулы $\sigma_\parallel$ к ее ширине $\sigma_\perp$. Следует отметить, что ограничивающая поверхность влияет на величину $\overline{P}_2$ только в очень тонком слое ($\sim 10{-}100$ nm [4]), а исследования, выполненные в рамках методом широкополосной диэлектрической спектроскопии [9], показали, что величина времени релаксации τ_{00}^1 относительно коротких осей молекул цианобифенилов (включая 8ОЦБ) в порах диаметром до $0.2\,\mu$m практически та же, что и соответствующая величина τ_{00}^1 в объеме образца. Поскольку время релаксации τ_{00}^1 связано с коэффициентом вращательной диффузии $D_\perp$ соотношением

$$\tau_{00}^1 = \left[D_\perp \frac{2 - 2\overline{P}_2}{1 - 2\overline{P}_2}\right]^{-1},$$

есть все основания считать величины $\overline{P}_2$ и $D_\perp$ зависящими только от температуры. Таким образом, отношение КВВ, измеренное вблизи заряженной ограничивающей поверхности γ_1^{eff}, к его объемному значению γ_1 принимает вид

$$\gamma_1^{\text{eff}}/\gamma_1 = \lambda/\lambda_{\text{eff}} = -(\gamma_1/\gamma_2)\cos 2\theta_{\text{eff}}(\bar{y}). \quad (19)$$

Абсолютные значения КВВ γ_1 и γ_2 в объеме нематической фазы 8ОЦБ, приведенные в [10]

T, K	340	345	350
γ_1, kgm/s	0.046	0.033	0.021
$-\gamma_2$, kgm/s	0.049	0.035	0.023

Располагая значениями коэффициентов вращательной вязкости в объеме нематика, например, для 8ОЦБ [10] (см. таблицу), можно рассчитать значения эффективной вращательной вязкости γ_1^{eff} и угла $\theta_{\text{eff}}(\bar{y})$. В случае больших скоростей деформаций $(\dot{\gamma} \geq 800\,\text{s}^{-1})$ отношение упомянутых КВВ принимает вид [11]

$$\gamma_1^{\text{eff}}/\gamma_1 = \lambda/\lambda_{\text{eff}} = \kappa\left[1 + \big(1 + (\overline{B}^4 - 1)\kappa^{-1}\big)^{1/2}\right]. \quad (20)$$

2. Результаты вычислений и их обсуждение

Полученные соотношения позволяют рассчитать как профили $\theta_{\text{eff}}(\bar{y})$, так и зависимость отношения КВВ $\gamma_1^{\text{eff}}/\gamma_1$ от расстояния до заряженной ограничивающей поверхности. В дальнейшем исследуем сдвиговый поток анизотропной системы, образованной молекулами 8ОЦБ вблизи поверхности оловянной окиси индия, в температурном интервале $T \in [340, 350]$ K,

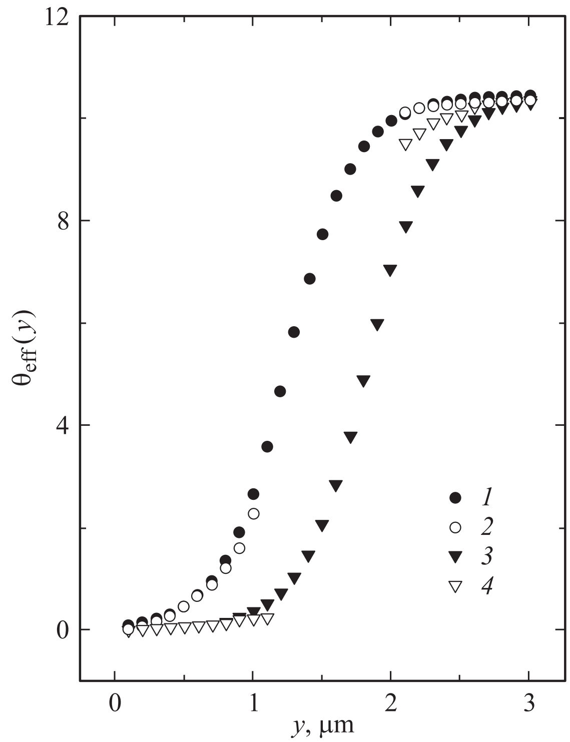

Рис. 1. Пространственная зависимость угла θ_{eff} в сдвиговом потоке нематического жидкого кристалла 8ОЦБ при температуре 340 K и гомеотропной ориентации молекул ($\theta_s = 0$) на ограничивающей заряженной поверхности ($\sigma = 10^{-3}\,\text{C/m}^2$). Для скоростей деформаций 100 (точки *3,4*) и $80\,\text{s}^{-1}$ (точки *1,2*) зависимости рассчитаны по формулам (15) (точки *1,4*) и (17) (точки *2,3*).

соответствующем нематической фазе [6]. Принимая во внимание тот факт, что объемная концентрация ионов в жидкокристаллической фазе равна $n_{\text{bulk}} = N_+/V = N_-/V \simeq 5 \cdot 10^{20}\,\text{m}^{-3}$ [6,12], можно рассчитать радиус экранирования Дебая [5,13]

$$\lambda_D = \left(\frac{\epsilon_0 \epsilon k_B T}{2e^2 n_{\text{bulk}}}\right)^{1/2},$$

где $e = 1.602 \cdot 10^{-19}\text{C}$ — заряд протона, $\epsilon = \epsilon_0(\epsilon_\parallel \cos^2\theta_s + \epsilon_\perp \sin^2\theta_s)$. В случае гомеотропной ориентации директора на ограничивающей поверхности ($\theta_s = 0$) радиус Дебая $\lambda_d = 0.55\,\mu\text{m}$, в то время как для планарной ориентации директора ($\theta_s = \pi/2$) радиус Дебая $\lambda_D = 0.28\,\mu\text{m}$. В наших расчетах поверхностная плотность заряда была выбрана равной $\sigma = 10^{-3}\,\text{C/m}^2$. Такая плотность заряда $\sigma = en_{\text{surf}}$ соответствует поверхностной концентрации носителей заряда $n_{\text{surf}} = 10^{16}\,\text{m}^{-2}$ и хорошо согласуется с экспериментальными данными $\sim 10^{15}{-}10^{16}\,\text{m}^{-2}$ [5,14]. Величина скорости деформации в наших расчетах изменялась в пределах $10{-}800\,\text{s}^{-1}$. На рис. 1 представлены результаты расчета угла $\theta_{\text{eff}}(y)$ с помощью уравнений (15) и (17) для случая гомеотропной ориентации директора на ограничивающей поверхности ($\theta_s = 0$) при поверхностной плотности заряда $\sigma = 10^{-3}\,\text{C/m}^{-2}$ и температуре 340 K. При этой температуре равновесный угол $\theta_{\text{eff}}(y)$ монотонно возрастает с ростом расстояния от ограничивающей поверхности, вплоть до объемного значения $\theta_{\text{eff}}(y \sim 3\,\mu\text{m}) = \theta_{\text{bulk}} = 10.35°$. Мы установили, что для потоков с большими скоростями деформаций $\dot{\gamma} \geq 800\,\text{s}^{-1}$ расчеты угла $\theta_{\text{eff}}(y)$ с помощью уравнения (15) (кривая *1*), учитывающего вклады в баланс моментов как гидродинамических, так и упругих и электрических сил, дают практически такой же результат, как и расчеты этого же угла с помощью уравнения (17) (кривая *2*), где учтены только вклады гидродинамических сил. С уменьшением величины $\dot{\gamma}$ возрастает роль упругих сил, что и приводит к смещению профиля угла $\theta_{\text{eff}}(y)$, рассчитанного с помощью уравнения (17) (кривая *3*), относительно профиля $\theta_{\text{eff}}(y)$, рассчитанного с помощью уравнения (15) (кривая *4*). Таким образом, при расчетах сдвиговых потоков НЖК в каналах с заряженными поверхностями учет упругих сил необходим при скоростях деформаций начиная с $\dot{\gamma} \simeq 800\,\text{s}^{-1}$ и меньше. Пространственная зависимость отношения $\gamma_1^{\text{eff}}/\gamma_1$

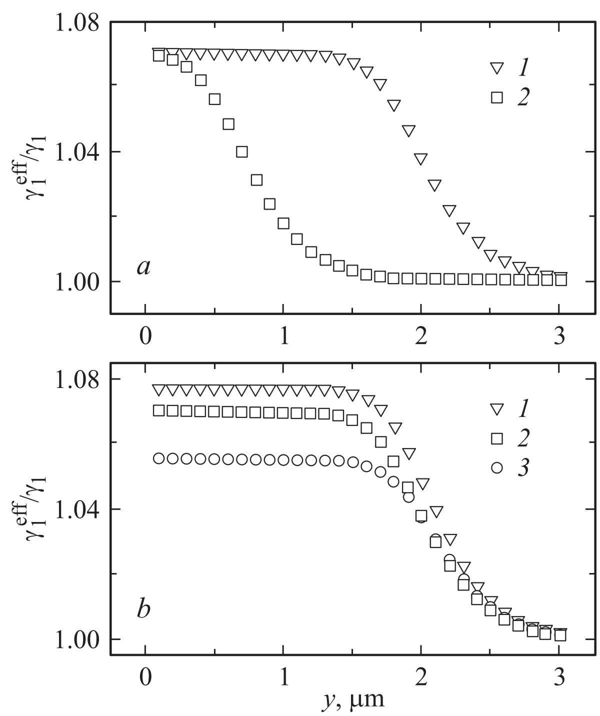

Рис. 2. *a* — пространственная зависимость отношения коэффициентов вращательной вязкости $\gamma_1^{\text{eff}}/\gamma_1$ нематических жидких кристаллов, образованных молекулами 8ОЦБ, при температуре 340 K. Значения $\gamma_1^{\text{eff}}/\gamma_1$ рассчитаны с помощью уравнения (19) для двух величин поверхностной плотности заряда: $\sigma = 10^{-3}$ (*1*) и 10^{-4} (*2*) C/m^2. Поверхностная ориентация молекул $\theta_s = 0$, $\dot{\gamma} = 100\,\text{s}^{-1}$. *b* — зависимость $\gamma_1^{\text{eff}}/\gamma_1$ от расстояния y до поверхности с гомеотропной ориентацией директора $\theta_s = 0$ при скорости деформации $\dot{\gamma} = 100\,\text{s}^{-1}$. Расчет осуществлен по уравнению (19) для трех температур: $T = 340\,\text{K}$ (*1*), 345 (*2*), 350 (*3*).

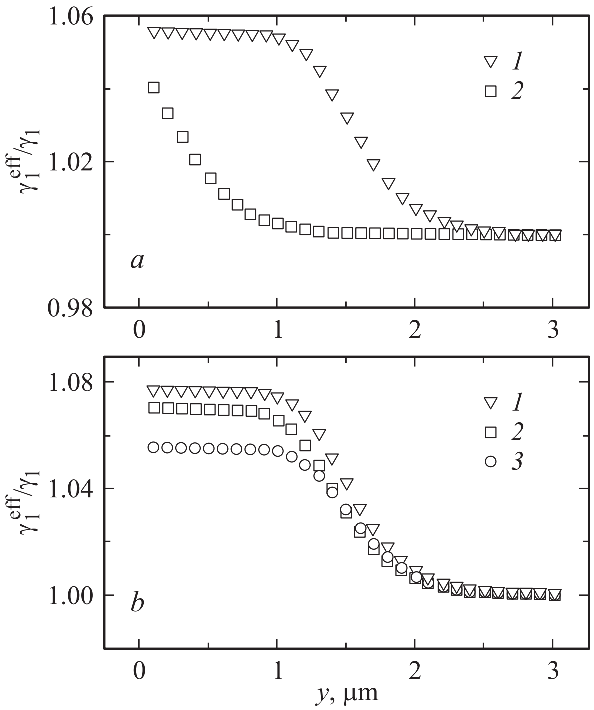

Рис. 3. То же, что на рис. 2 при скорости деформации $\dot{\gamma} = 800\,\text{s}^{-1}$.

для случая гомеотропной ориентации молекул 8ОЦБ на ограничивающей поверхности оловянной окиси индия ($\theta_s = 0$) для двух значений плотности заряда $\sigma = 10^{-3}$ (1) и $10^{-4}\,\text{C/m}^{-2}$ (2) при температуре 340 K и скоростях деформаицй $\dot{\gamma} = 100$ и $200\,\text{s}^{-1}$ соответственно представлена на рис. 2, *a* и 3, *a*. Характер зависимостей $\gamma_1^{\text{eff}}/\gamma_1$ свидетельствует о том, что электрические силы проникают в объем сдвигаемого потока на глубину $\sim 3\,\mu$m. По мере приближения к поверхности эффективный КВВ γ_1^{eff} возрастает, причем рост может составить до 7.8% по отношению к γ_1. Величина плотности поверхностного заряда влияет на глубину проникновения электрических сил; рост σ на один порядок с 10^{-4} до $10^{-3}\,\text{C/m}^{-2}$ в случае сдвиговых потоков со скоростью деформации $\dot{\gamma} = 100\,\text{s}^{-1}$ ведет к увеличению глубины проникновения электрических сил на $\sim 1.5\,\mu$m. На рис. 2, *b* и 3, *b* представлены результаты расчета γ_1^{eff} для случая гомеотропной ориентации директора на ограничивающей поверхности для трех температур: 340 (*1*); 345 (*2*); 350 (*3*) K соответственно для $\dot{\gamma} = 100$ (рис. 2, *b*) и $800\,\text{s}^{-1}$ (рис. 3, *b*). В обоих случаях с ростом температуры эффективный КВВ γ_1^{eff} убывает.

Анализ рис. 2, *a* и 3, *a* указывает на увеличение глубины проникновения электрического поля в сдвиговый поток по мере уменьшения скорости деформации, что в свою очередь ведет к росту эффективного КВВ γ_1^{eff}.

На рис. 4 представлены результаты расчета пространственных зависимостей $\gamma_1^{\text{eff}}/\gamma_1$ для случая планарной ориентации директора на ограничивающей поверхности ($\theta_s = \pi/2$): на рис. 4, *a* для трех температур: 340, 345, 350 K при $\sigma = 10^{-3}\,\text{C/m}^{-2}$ и $\dot{\gamma} = 100\,\text{s}^{-1}$, на рис. 4, *b* для температуры 340 K при $\sigma = 10^{-3}\,\text{C/m}^{-2}$ и трех скоростей деформаций $\dot{\gamma} = 100, 200, 300\,\text{s}^{-1}$ соответственно. Во всех этих случаях глубина проникновения электрических сил в объем сдвигового потока в 2 раза меньше, чем для случая гомеотропной ориентации, и составляет $\sim 1.5\,\mu$m. Поскольку недавно абсолютные значения γ_i $(i = 1, 2)$ в объемной нематической фазе 8ОЦБ были рассчитаны (см. таблицу), легко вычислить и абсолютные значения γ_1^{eff}. Следует также отметить, что неограниченный рост плотности поверхностного потенциала σ, ведет, согласно уравнению (20), к $\lim\limits_{\sigma\to\infty} \gamma_1^{\text{eff}}/\gamma_1 = -\gamma_2/\gamma_1$ при неограниченном росте глубины проникновения электрических сил в объем образца. Максимальный прирост γ_1^{eff} по отношению к γ_1, таким образом, составляет $\sim 6{-}8\%$ [10,15]. В другом предельном случае, когда $\sigma \to 0$, $\lim\limits_{\sigma\to\infty} \gamma_1^{\text{eff}}/\gamma_1 = 1$.

Таким образом, в настоящей работе в рамках теории Эриксона–Лесли исследовано влияние заряженной ограничивающей поверхности на вращательную вязкость в сдвиговом потоке нематического жидкого кристалла. Для того чтобы понять, вносят ли дальнодействую-

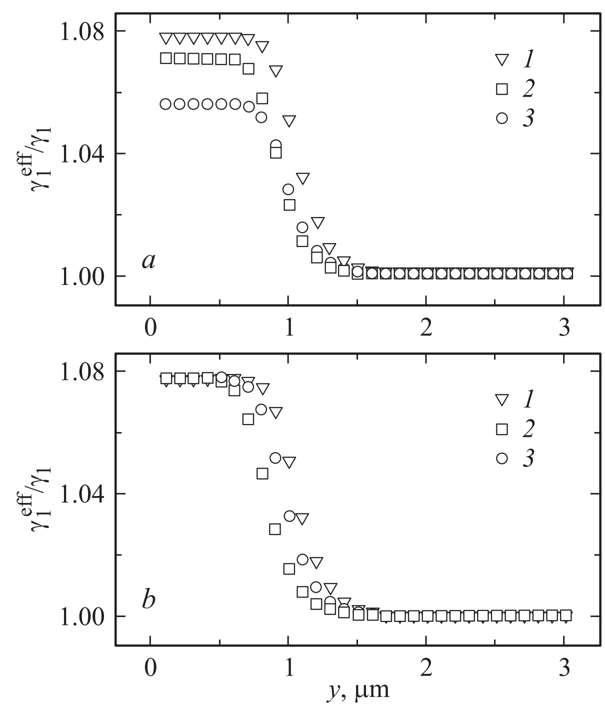

Рис. 4. *a* — пространственная зависимость отношения коэффициентов вращательной вязкости $\gamma_1^{\text{eff}}/\gamma_1$ нематических жидких кристаллов, образованных молекулами 8ОЦБ, для случая планарной ориентации директора на ограничивающей поверхности ($\theta_s = \pi/2$) для трех температур 340 (*1*), 345 (*2*), 350 (*3*). Скорость деформации $\dot{\gamma} = 100\,\text{s}^{-1}$, $\sigma = 10^{-3}\,\text{C/m}^2$. *b* — зависимость $\gamma_1^{\text{eff}}/\gamma_1$ от расстояния *y* до поверхности с планарной ориентацией директора на ограничивающей поверхности для трех скоростей деформации $\dot{\gamma} = 100\,\text{s}^{-1}$ (*1*), 200 (*2*), 300 (*3*). Температура равна 340 K, $\sigma = 10^{-3}\,\text{C/m}^2$.

щие электрические силы вклад в коэффициенты вращательной вязкости и угол предельной ориентации, образующийся между направлением сдвигового потока Куэтта и направлением директора, в уравнении баланса моментов, действующих на элементарный объем, были учтены слагаемые, вызванные гидродинамическими, упругими и электрическими силами. Установлено, что коэффициент эффективной вращательной вязкости возрастает по мере приближения к поверхности. В случае жидкого кристалла, образованного молекулами 4-n-октилокси-4′-цианобифенила, этот рост может составить до 7.8% от величины объемного КВВ γ_1. Установлено также, что в сдвиговых потоках со скоростями деформаций $\dot{\gamma} \geq 800\,\mathrm{s}^{-1}$ вкладами в баланс моментов, обусловленными упругими силами, можно пренебречь.

Список литературы

[1] J.L. Ericksen, Arch. Ratio. Mech. Anal. **4**, 231 (1960).
[2] F.M. Leslie, Arch. Ratio. Mech. Anal. **28**, 265 (1968).
[3] P.G. de Gennes, J. Prost. The Physics of Liquid Crystals. 2nd ed. Oxford University Press, Oxford (1995). P. 360.
[4] A.V. Zakharov. Phys. Rev. **E51**, 6802 (1995).
[5] J.N. Israelachvili. Intermolecular and Surface Forces. 2nd ed. Academic Press, London (1992), 435 p.
[6] A.V. Zakharov, R.Y. Dong. J. Chem. Phys. **116**, 6348 (2002).
[7] В.Ф. Зайцев, А.Д. Полянин. Справочник по обыкновенным дифференциальным уравнениям. Физ.-мат. лит., М. (2001). С. 576.
[8] N. Kuzuu, M. Doi. J. Phys. Soc. Jpn. **52**, 3486 (1983).
[9] S.A. Rozanski, R. Stunnarius, H. Groothues, F. Kremer. Liq. Cryst. **20**, 59 (1996).
[10] A.V. Zakharov, R. Dong. Phys. Rev. **E63**, 011 704 (2001).
[11] A.V. Zakharov, R. Dong. Eur. Phys. J. **E7** 267 (2002).
[12] S. Ponti, P. Ziherl, C. Ferrero, S. Zumer. Liq. Cryst. **26**, 1171 (1999).
[13] R.N. Thurston, J. Cheng, R.B. Meyer, G.D. Boyd. J.Appl. Phys. **56**, 263 (1984).
[14] S. Ponti, P. Ziherl, C. Ferrero, S. Zumer. Liq. Cryst. **26**, 1171 (1999).
[15] A.G. Chmielewski. Mol. Cryst. Liq. Cryst. **132**, 319 (1986).