14,15

Влияние электрического поля и градиента температуры на формирование гидродинамического течения в тонком нематическом капилляре

© А.В. Захаров[1], С.В. Пасечник[2], Г.И. Максимочкин[2]

[1] Институт проблем машиноведения РАН,
Санкт-Петербург, Россия
[2] Московский технологический университет,
Москва, Россия
E-mail: alexandre.zakharov@yahoo.ca

(Поступила в Редакцию 14 мая 2018 г.)

Предложено теоретическое описание принципов немеханической транспортировки микролитровых объемов жидкого кристалла (ЖК) инкапсулированного в тонкий капилляр. Численными методами, в рамках нелинейного обобщения классической теории Эриксена-Лесли, были исследованы различные режимы формирования гидродинамического потока в однородно ориентированной ЖК-полости под действием градиента температуры и двойного электростатического слоя, естественно возникающего на границе раздела ЖК-фаза/твердое тело. Найдены размеры ЖК-капилляра и параметры необходимого теплового воздействия позволяющего инициировать течение ЖК-фазы в горизонтальном направлении.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант № 16-02-00041а) и Минобрнауки (гранты 3.11888.2018/11.12 и 3.9585.2017/8.9).

DOI: 10.21883/FTT.2018.12.46740.130

1. Введение

Методы нано- и микрофлюидистики в последнее время находят широкое применение не только при исследовании процессов транспортировки и сортировки нанолитровых капель жидкости и жидких кристаллов (ЖК) в разветвленных каналах и капиллярах (lab-on-chip-system), но и в разнообразных семействах сенсоров и датчиков на основе термо- и лиотропных ЖК-материалов [1,2] используемых в биотехнологических приложениях, медицине и иммерсионной литографии. Еще одной не менее интригующей областью применения микролитровых объемов ЖК-материалов являются биометрические оптические системы, где основным элементом являются ЖК-микролинзы (ЖКЛ) с регулируемым фокусным расстоянием (tunable liquid crystal microlenses) [3,4]. В этих ЖКЛ изменение фокусного расстояния достигается посредством управляющего электрического поля [5,6]. В основу другого способа позволяющего манипулировать фокусным расстоянием в ЖКЛ положен принцип основанный на взаимодействии градиентов температуры и поля директора ЖК-капли [7,8]. Это взаимодействие ведет к деформации свободной границы раздела ЖК-фаза/воздух и, тем самым, способствует изменению фокусного расстояния в ЖКЛ [9]. Поскольку при изготовлении ЖКЛ с изменяющимися фокусными расстояниями используют очень деликатные способы производства, то с неизбежностью возникает необходимость всестороннего изучения влияния электрического поля и градиентов температуры на структурные и гидродинамические свойства таких ЖК-систем.

Недавно был предложен новый метод транспортировки микролитровых ЖК-капель инкапсулированных в тонкие (микрометровых размеров) каналы и капилляры за счет взаимодействия градиентов температуры и поля директора ЖК-фазы [10]. Было показано, что необходимым и достаточным условием возникновения направленного горизонтального потока в гибридно-ориентированном ЖК-канале, в котором ориентация поля директора на одной из ограничивающих поверхностей планарная, а на другой — гомеотропная, является взаимодействие градиентов температуры и поля директора. В случае однородно-ориентированной ЖК-фазы, когда ориентация поля директора на ограничивающих поверхностях либо планарная, либо гомеотропная, направленное течение ЖК-фазы под действием градиента температуры отсутствует. В этом случае чтобы инициировать горизонтальное течение ЖК-фазы, необходимо деформировать однородно ориентированную ЖК-среду, с тем чтобы создать градиент поля директора. Этим фактором, который позволит деформировать планарно-ориентированную ЖК-полость, заключенную между двумя коаксиальными цилиндрами, может служить перпендикулярно направленное электрическое поле. Таким полем может являтся электростатическое поле двойного электрического слоя, естественно возникающего на границе раздела ЖК-фаза/твердое тело. Поскольку ЖК представляет собой слабый электролит, в котором число ионов практически равно числу катионов, то в пристенном слое на границе раздела ЖК-фаза/твердое тело возникает двойной электрический слой с плотностью заряда σ. Электрическое поле создаваемое этим зарядом пронизывает ЖК-фазу на расстояние порядка длины дебаевской экранировки XD [11] и способно деформировать пристенные слои однородно-ориентированной ЖК-полости. Если к тому же в ЖК-полости удастся создать градиент температуры, например за счет джоулевого разогрева внутреннего цилиндра, при термической изолированности внешнего цилиндра, то создаются все предпосылки для того, чтобы в ЖК-полости сформировался гидродинамический поток направленный параллельно ограничивающим цилиндрам. При этом возникает вопрос: какой должна быть плотность заряда двойного электрического слоя для того, чтобы осуществить деформацию ЖК-фазы и тем самым инициировать горизонтальный поток ЖК-материала.

Исследование этих новых состояний будет проведено в рамках нелинейного обобщения классической теории Эриксена-Лесли [12,13] с учетом балансов массы, импульсов и моментов действующих на единицу объема ЖК-материала. Численными методами будут исследованы различные гидродинамические режимы формирования гидродинамического течения в микроразмерной планарно ориентированной ЖК-полости, заключенной между двумя коаксиальными цилиндрами, под действием радиально направленного градиента температуры и электростатического поля, естественно возникающего на границе раздела ЖК-фаза/твердое тело.

2. Основные уравнения

Рассмотрим цилиндрическую полость между двумя горизонтальными, коаксиально расположенными цилиндрами с радиусами R_1 и R_2 $(R_2 > R_1)$, заполненную жидким кристаллом. Будем рассматривать два случая сцепления ЖК-молекул с ограничивающими цилиндрами. Первый случай, случай сильного сцепления (S), когда граничные условия могут быть записаны в виде

$$\theta(r)_{r=R_1} = \theta(r)_{r=R_2} = 0, \tag{1}$$

и случай слабого сцепления (W), когда граничные условия могут быть записаны в виде

$$K_1\left(\frac{\partial\theta(r)}{\partial r}\right)_{r=R_1,R_2} = \frac{A}{2}\sin 2\Delta\theta^{\pm}, \tag{2}$$

где θ — угол между направлением директора $\hat{\mathbf{n}}$ и ортом $\hat{\mathbf{e}}_z$, K_1 — коэффициент упругости продольного изгиба, $\mathscr{W} = \frac{1}{2}A\sin^2\Delta\theta^{\pm}$ — плотность энергии сцепления ЖК-молекул с ограничивающими цилиндрами, $\Delta\theta^{\pm} = \theta_s^{\pm} - \theta_0^{\pm}$, $\theta_s^{\pm} = (\theta_s)_{r=R_1,R_2}$ и $\theta_0^{\pm} = (\theta_0)_{r=R_1,R_2}$ — углы соответствующие ориентации директора $\hat{\mathbf{n}}$ и оси легкого ориентирования $\hat{\mathbf{u}}$ на ограничивающих цилиндрах соответственно.

Система координат выбрана так, что директор $\hat{\mathbf{n}}$ лежит в плоскости (rz) образованной радиальным ортом $\hat{\mathbf{e}}_r$ и ортом $\hat{\mathbf{e}}_z$, направленным вдоль оси коаксиальных цилиндров, в то время как тангенциальный орт равен $\hat{\mathbf{e}}_\varphi = \hat{\mathbf{e}}_z \times \hat{\mathbf{e}}_r$. Будем предполагать, что внутренняя поверхность цилиндра $(r = R_1)$ разогрета, например, посредством пропускания электрического тока (джоулев разогрев), а внешняя поверхность цилиндра $(r = R_2)$ термически изолирована и на ней поддерживается постоянная температура T_{out}. Это предполагает, что через внутреннюю поверхность цилиндра в ЖК-фазу поступает поток тепла $\mathbf{q}_{\mathrm{in}}$ и граничное условие на внутреннем цилиндре принимает вид

$$\lambda_\perp\left(\frac{\partial T}{\partial r}\right)_{r=R_2} = -q_{\mathrm{in}}, \tag{3}$$

в то время как на внешнем цилиндре граничное условие для поля температуры имеет вид

$$T_{r=R_2} = T_{\mathrm{out}}. \tag{4}$$

Здесь $\lambda_\perp$ — коэффициент теплопроводности в направлении перпендикулярном направлению директора $\hat{\mathbf{n}}$.

Принимая во внимание тот факт, что ЖК-фаза обычно содержит практически равное количество ионов и катионов (слабый электролит) и находясь в контакте с твердой ограничивающей поверхностью образует двойной электрический слой с плотностью заряда σ. Электростатическое поле $\mathbf{E}$ инициируемое плотностью электрического заряда σ проникает в объем ЖК-фазы на глубину порядка дебаевской длины экранировки $\lambda_D = \sqrt{\frac{\epsilon\epsilon_0 k_B T}{2e^2 n_{eq}}}$ и может быть рассчитано в рамках теории Пуассона–Больцмана как [11]

$$\mathbf{E}(r) = E_0\mathscr{E}(r)\hat{\mathbf{e}}_r = E_0\,\frac{C_I\mathscr{K}_1\left(\frac{r}{\lambda_D}\right) - C_K\mathscr{T}_1\left(\frac{r}{\lambda_D}\right)}{\Delta}\,\hat{\mathbf{e}}_r, \tag{5}$$

где $E_0 = \sigma/(\epsilon_0\overline{\epsilon})$ — поверхностное электростатикеское поле, ϵ_0 — диэлектрическая проницаемость вакуума, $\overline{\epsilon} = (\epsilon_\parallel + 2\epsilon_\perp)/3$ — диэлектрическая проницаемость ЖК-среды, $\epsilon_\parallel$ и $\epsilon_\perp$ — диэлектрические постоянные вдоль и поперек направления директора $\hat{\mathbf{n}}$ соответственно, $\epsilon = \epsilon_\parallel\cos^2\theta_s + \epsilon_\perp\sin^2\theta_s$, e — заряд протона, k_B — постоянная Больцмана, θ_s — значение угла между направлением директора $\hat{\mathbf{n}}_s$ и ортом $\hat{\mathbf{e}}_z$ на ограничивающих поверхностях и n_{eq} — концентрация ионов в объеме ЖК-фазы. Здесь

$$\Delta = \mathscr{I}_1\left(\frac{R_2}{\lambda_D}\right)\mathscr{K}_1\left(\frac{R_1}{\lambda_D}\right) - \mathscr{I}_1\left(\frac{R_1}{\lambda_D}\right)\mathscr{K}_1\left(\frac{R_2}{\lambda_D}\right),$$

$$C_I = \frac{\mathscr{I}_1\left(\frac{R_1}{\lambda_D}\right) + \mathscr{I}_1\left(\frac{R_2}{\lambda_D}\right)}{\Delta}, \quad C_K = \frac{\mathscr{K}_1\left(\frac{R_1}{\lambda_D}\right) + \mathscr{K}_1\left(\frac{R_2}{\lambda_D}\right)}{\Delta},$$

$\mathscr{I}_1$ и $\mathscr{K}_1$ — модифицированные функции Бесселя первого порядка и второго рода соответственно.

Поле скорости $\mathbf{v}$ подчиняется условию прилипания на ограничивающих цилиндрах и может быть записано в виде

$$\mathbf{v}_{r=R_1} = \mathbf{v}_{r=R_2} = 0. \tag{6}$$

Учитывая малую толщину ЖК-полости $d = R_2 - R_1$ $\sim 100-200$ nm можно предположить, что плотность ρ_m

ЖК-фазы мало меняется вдоль радиуса r и условие несжимаемости может быть записано в виде $\nabla \cdot \mathbf{v} = 0$. Последнее условие, рассмотренное совместно с условием прилипания (6), приводит к тому, что в рамках нашей модели существует только одна компонента вектора скорости $\mathbf{v}$, направленная параллельно ограничивающим цилиндрам, т. е., $\mathbf{v}(t, r) = v_z(t, r)\hat{\mathbf{e}}_z \equiv u(t, r)\hat{\mathbf{e}}_z$.

Таким образом, цель нашей статьи исследовать реакцию однородно ориентированной ЖК-полости, инкапсулированной между двумя горизонтальными, коаксиально расположенными цилиндрами под действием как радиально направленного градиента температуры, так и электростатического поля $\mathbf{E}(r)$ инициированного двойным электрическим слоем.

Гидродинамические уравнения описывающие процесс переориентации орнородно ориентированной ЖК-полости состоят из уравнения баланса моментов и импульсов действующих на единицу объема ЖК-фазы, и уравнения баланса энтропии. Баланс моментов образован упругим $\mathbf{T}_{\text{elast}} = (\delta W_F/\delta\hat{\mathbf{n}}) \times \hat{\mathbf{n}}$, вязким $\mathbf{T}_{\text{vis}} = (\delta\mathcal{R}_{\text{vis}}/\delta\hat{\mathbf{n}}) \times \hat{\mathbf{n}}$, термомеханическим $\mathbf{T}_{\text{tm}} = (\delta\mathcal{R}_{\text{tm}}/\delta\dot{\hat{\mathbf{n}}})\hat{\mathbf{n}}$ и электрическим $\mathbf{T}_{\text{el}} = -\epsilon_0\epsilon_a \mathbf{E} \times \hat{\mathbf{n}}(\mathbf{E} \cdot \hat{\mathbf{n}})$ вкладами соответственно. Здесь $\dot{\hat{\mathbf{n}}} = \frac{d\hat{\mathbf{n}}}{dt} = \frac{\partial\hat{\mathbf{n}}}{\partial t} \equiv \hat{\mathbf{n}}_{,t}$ — материальная производная директора $\hat{\mathbf{n}}$, $W_F = \frac{1}{2}\left[K_1(\nabla \cdot \hat{\mathbf{n}})^2 + K_3(\hat{\mathbf{n}} \times \nabla \times \hat{\mathbf{n}})^2\right]$ $= \frac{1}{2}\left[K_1\left(\cos\theta\theta_{,r} + \frac{\sin\theta}{r}\right) + K_3 \sin^2\theta\theta_{,r}^2\right]$ представляет собой плотность упругой энергии, K_1 и K_3 — упругие коэффициенты продольного и поперечного изгибов, $\mathcal{R} = \mathcal{R}_{\text{vis}} + \mathcal{R}_{\text{tm}} + \mathcal{R}_{\text{th}}$ — полная диссипационная функция Релея, где $\mathcal{R}_{\text{vis}} = \frac{1}{2}\left[\bar{h}(\theta)u_{,r}^2 + 2\bar{\mathcal{A}}(\theta)\theta_{,t}u_{,r} + \gamma_1\theta_{,t}^2\right]$ — вязкий, $\mathcal{R}_{\text{tm}} = \xi T_{,r}\left[\theta_{,t}\left(\frac{1}{2} + \cos^{12}\theta\right) + \frac{3\sin 2\theta}{4r}\right) - u_{,r}\sin\theta\cos\theta$ $\times\left(\theta_{,r}(1 + \frac{1}{4}\sin\theta) + \frac{3}{2r}\right)\Big]$ — термомеханический и $\mathcal{R}_{\text{th}} =$ $= \frac{1}{2T}\left(\chi_{\parallel}(\hat{\mathbf{n}} \cdot \nabla T)^2 + \lambda_{\perp}\left(\nabla T - \hat{\mathbf{n}}(\hat{\mathbf{n}} \cdot \nabla T)\right)^2\right) = \frac{1}{2T}\left(\lambda_{\parallel}\sin^2\theta\right.$ $\left.+ \lambda_{\perp}\cos^2\theta\right)T_{,r}^2$ — термический вклады в диссипационную функцию соответственно. Функции $\hat{h}(\theta) = \frac{1}{2}(2\alpha_4 + \gamma_1$ $+ \alpha_5 + \alpha_6) + \alpha_1\sin^2\theta\cos^2\theta + \frac{1}{2}\gamma_2\cos 2\theta$ и $\bar{\mathcal{A}}(\theta) =$ $= -\frac{1}{2}(\gamma_1 + \gamma_2\cos 2\theta)$ являются гидродинамическими функциями, $u_{,r} = \partial u(t, r)/\partial r$, $\theta_{,t} = \partial\theta(t, r)/\partial t$, $\xi \sim 10^{-12}$ [J/mK] — термомеханическая постоянная [14], $\alpha_1(T) - \alpha_6(T)$ — шесть коэффициентов вязкости Лесли, $\gamma_1(T)$ и $\gamma_2(T)$ — коэффициенты вращательной вязкости (КВВ), а $\lambda_{\parallel}$ — коэффициент теплопроводности вдоль направления директора $\hat{\mathbf{n}}$.

Безразмерное уравнение баланса моментов действующих на единицу объема ЖК-фазы имеет вид [15]

$$\gamma_1(\chi)\theta_{,\tau} = \mathcal{A}(\theta)u_{,r} + \delta_1\Bigg[(\mathcal{G}(\theta)\theta_{,r})_{,r} - \frac{1}{2}\mathcal{G}_\theta(\theta)\theta_{,r}^2 + \frac{g(\theta)\theta_{,r}}{r} - \frac{1}{2}\left(\frac{K_1(\chi)}{K_{10}r}\right)_{,r}\sin 2\theta\Bigg] - \delta_2\chi_{,r}\left[\theta_{,r}\left(\frac{1}{2} + \cos^2\theta\right) + \frac{3}{4r}\sin 2\theta\right] + \frac{1}{2}\mathcal{E}^2(r)\sin 2\theta, \tag{7}$$

где $\gamma_1(\chi) = \gamma_1(\chi)/\gamma_{10}$, γ_{10} и K_{10} — наибольшие значения КВВ $\gamma_1(\chi)$ и упругого коэффициента $K_1(\chi)$ в температурном интервале $[\chi_{\text{out}}, \chi_{\text{in}}]$, соответствующем стабильной нематической фазе, $\chi(\tau, r) = T(\tau, r)/T_{NI}$ — безразмерная температура, $\tau = \left(\frac{\epsilon_0\epsilon_a E_0^2}{\gamma_{10}}\right)t$ — безразмерное время, $\bar{r} = r/(R_2 - R_1)$ — безразмерный полярный радиус, $\mathcal{A}(\theta) = \bar{\mathcal{A}}/\gamma_{10}$ и $\mathcal{G}(\theta) = \frac{1}{K_{10}}\left(K_1(\chi)\cos^2\theta + K_3(\chi)\sin^2\theta\right)$ — безразмерные гидродинамическая и упругая функции, $\delta_1 = \left(\frac{E_{\text{th}}}{\pi E_0}\right)^2$ и $\delta_2 = \delta_1\xi\frac{T_{NI}}{K_{10}}$ — параметры ЖК-системы, а $E_{\text{th}} = \frac{\pi}{s}\sqrt{\frac{K_{10}}{\epsilon_0\epsilon_a}}$ — критическое значение электрического поля $E(r)$. В уравнении (7) и в последующем изложении черта над переменной r была (и будет) опущена.

Безразмерное уравнение баланса импульсов действующих на единицу объема ЖК-фазы имеет вид [15]

$$\delta_3 u_{,\tau}(\tau, r) = \nabla_r\sigma_{rz,r}, \tag{8}$$

$$\mathcal{P}_{,r}(\tau, r) + \frac{\delta\mathcal{R}}{\delta\theta_{,\tau}}\theta_{,r} = 0, \tag{9}$$

где $\sigma_{rz} = \frac{\delta\mathcal{R}}{\delta u_{,r}} = h(\theta)u_{,r} - \mathcal{A}(\theta)\theta_{,\tau} - \frac{1}{2}\delta_2\chi_{,r}\sin 2\theta\big[\theta_{,r}\big(1$ $+ \frac{1}{4}\sin\theta\big) + \frac{3}{2r}\big]$ — сдвиговая компонента тензора напряжения (TH), $h(\theta) = \bar{h}(\theta)/\gamma_{10}$ — безразмерное гидростатическое давление в ЖК-системе, а $\delta_3 = \rho\frac{K_{10}}{\gamma_{10}^2}\left(\frac{\pi E_0}{E_{\text{th}}}\right)^2$ — еще один параметр системы. В случае малых градиентов температуры $\nabla\chi$ по сечению ЖК-полости безразмерное уравнение баланса энтропии может быть записано в виде [15]

$$\delta_4\chi_{,\tau}(\tau, r) = [\chi_{,r}(\lambda\sin^2\theta + \cos^2\theta)]_{,r} + \delta_5\chi\theta_{,\tau}\left[\left(\frac{1}{2} + \cos^2\theta\right) + \frac{3\sin 2\theta}{4r}\right] - \delta_5\frac{1}{2}\left[u_{,r}\sin 2\theta\left(\theta_{,r}\left(1 + \frac{1}{4}\sin\theta\right) + \frac{3}{2r}\right)\right]_{,r}, \tag{10}$$

где $\delta_4 = \rho\frac{C_p d^2\epsilon_0\epsilon_a E_0^2}{\gamma_{10}\lambda_{\perp}}$ и $\delta_5 = \xi\frac{\epsilon_0\epsilon_a E_0^2}{\gamma_{10}\lambda_{\perp}}$ — два дополнительных параметров ЖК-системы, $\lambda = \lambda_{\parallel}/\lambda_{\perp}$ и C_p — коэффициент теплоемкости ЖК-фазы. Таким образом, множество параметров ЖК-системы входящих в уравнения (7)–(10) имеют вид:

$$\delta_1 = \left(\frac{E_{\text{th}}}{\pi E_0}\right)^2, \ \delta_2 = \delta_1\xi\frac{T_{NI}}{K_{10}}, \ \delta_3 = \rho\frac{K_{10}}{\gamma_{10}^2}\left(\frac{\pi E_0}{E_{\text{th}}}\right)^2,$$

$$\delta_4 = \rho\frac{C_p d^2\epsilon_0\epsilon_a E_0^2}{\gamma_{10}\lambda_{\perp}}, \ \delta_5 = \xi\frac{\epsilon_0\epsilon_a E_0^2}{\gamma_{10}\lambda_{\perp}}.$$

Теперь граничные условия для поля директора $\hat{\mathbf{n}}$ в безразмерном виде могут быть записаны как

$$\theta(r)_{r=a} = \theta(t)_{r=a+1} = 0, \tag{11}$$

(случай (S) сильного сцепления ЖК-молекул с ограничивающими цилиндрами) и

$$\left(\frac{\partial\theta(r)}{\partial r}\right)_{r=a} = \mathscr{D}\,\frac{K_1(\chi_{\text{out}})}{K_1(\chi_{\text{in}})},\quad \left(\frac{\partial\theta(r)}{\partial r}\right)_{r=a+1} = \mathscr{D}, \tag{12}$$

(случай (W) слабого сцепления ЖК-молекул с ограничивающими цилиндрами), где $\mathscr{D} = \frac{Ad}{K_1\,(\chi_{\text{out}})\,\Delta\theta^{\pm}}$ — безразмерный параметр соответствующий случаю (W).

В свою очередь, граничные условия для поля скорости и температуры можно переписать в виде

$$u(r)_{r=a} = u(r)_{r=a+1} = 0, \tag{13}$$

$$\left(\frac{\partial\chi(\tau, r)}{\partial r}\right)_{r=a} = -Q,\quad \chi_{r=a+1} = \chi_{\text{out}}. \tag{14}$$

Здесь $Q = \frac{qd}{T_{NY}\lambda_{\perp}}$ — безразмерный поток тепла с внутреннего ограничивающего цилиндра в ЖК-полость, $d = R_2 - R_1$, $a = R_1/d$ и $a+1$ соответствуют безразмерным значениям внутреннего и внешнего радиусов ограничивающих цилиндров.

Для 4−n-пентил-4′-цианобифенила (5ЦБ), при температуре $T_{\text{out}} = 298\,\text{K}$ и плотности $10^3\,\text{kg/m}^3$, величины параметров, входящих в уравнения (7)−(10), имеют следующие значения: $\delta_1 \sim 2.5\cdot 10^{-3}$, $\delta_2 \sim 0.07$, $\delta_3 \sim 0.9\cdot 10^{-3}$, $\delta_4 \sim 0.47$ и $\delta_5 \sim 1.15\cdot 10^{-6}$ соответственно. Поскольку значение плотности заряда было выбрано равным $\sigma = 4\cdot 10^{-3}\,\text{C/m}^2$, то поверхностная плотность заряда равная $\sigma = n_{\text{surf}}e$ была оценена как $n_{\text{surf}} \sim 2\cdot 10^{16}\,\text{m}^{-2}$, что близко к экспериментально полученным данным $n_{\text{surf}} \sim 10^{15}{-}10^{16}\,\text{m}^{-2}$ [11]. Величина дебаевской длины экранировки $\lambda_D = \sqrt{\frac{\epsilon\epsilon_0 k_B T}{2e^2 n_{eq}}}$ зависит исключительно от свойств ЖК-фазы, и в нашем случае равна $\lambda_D \sim 50\,\text{nm}$. Далее, принимая во внимание тот факт, что $\delta_3 \ll 1$, уравнение (8) может быть редуцировано к виду

$$\sigma_{rz} = h(\theta)u_{,r} - \mathscr{A}(\theta)\theta_{,\tau} - \delta_2\chi_{,r}\sin\theta\cos\theta$$
$$\times\left[\theta_{,r}\left(1+\frac{1}{4}\sin\theta\right)+\frac{3}{2r}\right] = \frac{C(\tau)}{r}, \tag{15}$$

где $C(\tau)$ — функция не зависящая от r и определяется граничным условием (13). В свою очередь, уравнение (10) может быть также упрощено, поскольку $\delta_5 \ll 1$. После упрощения оно принимает вид

$$\delta_4\chi_{,\tau}(\tau, r) = [\chi_{,r}(\lambda\sin^2\theta + \cos^2\theta)]_{,r}. \tag{16}$$

Таким образом, переориентация поля директора и формирование горизонтального потока в ЖК-полости инкапсулированной между двумя коаксиальными цилиндрами может быть описана уравнениями (7), (15) и (16), совместно с граничными условиями описанными уравнениями (11)−(14) и начальным условием $\theta(\tau = 0, r) = 0.001$ $(a < r < a+1)$.

3. Решение гидродинамических уравнений и основные результаты

Процесс переориентации поля директора $\hat{\mathbf{n}}(\tau, r)$, описываемый углом $\theta(\tau, r)$, перераспределение поля температуры $\chi(\tau, r)$ и формирование горизонтального потока $u(\tau, r)$ в ЖК-полости между двумя коаксиальными цилиндрами под действием градиента температуры и под влиянием электростатического поля, возникающего за счет двойного электрического слоя на границе раздела ЖК-фаза/твердое тело, описывается системой нелинейных дифференциальных уравнений в частных производных (7), (15) и (16) совместно с граничными условиями (11)−(14) и начальными условиями для угла $\theta(\tau = 0) = 0.001$ $(a < r < a+1)$ и скорости $u(\tau = 0) = 0$ соответственно. В расчетах были выбраны следующие величины: толщина ЖК-полости $d = 0.2\,\mu\text{m}$, безразмерный тепловой поток $Q = 0.04$ $(\sim 12\,\mu\text{W}/\mu\text{m}^2)$, плотность поверхностного заряда $\sigma = 4\cdot 10^{-3}\,\text{C/m}^2$. Вычисления были проведены для двух значений радиуса внутреннего цилиндра: $a = 0.25$ (вариант I (более искривленная геометрия)) и $a = 2.0$ (вариант II (менее искривленная геометрия)) соответственно, а безразмерный параметр соответствующий случаю слабого сцепления ЖК-молекул с ограничивающими цилиндрами был выбран равным $\mathscr{D} = 0.1$.

На рис. 1, a представлено распределение электростатического поля $E(r)/E_{\text{th}}$ по сечению ЖК-полости, обусловленное поверхностной плотностью заряда $\sigma = 4\cdot 10^{-3}\,\text{C/m}^2$ на обеих ограничивающих поверхностях и рассчитанное с помощью уравнения (4) для значений $a = 0.25$ (вариант I (более искривленная геомет-

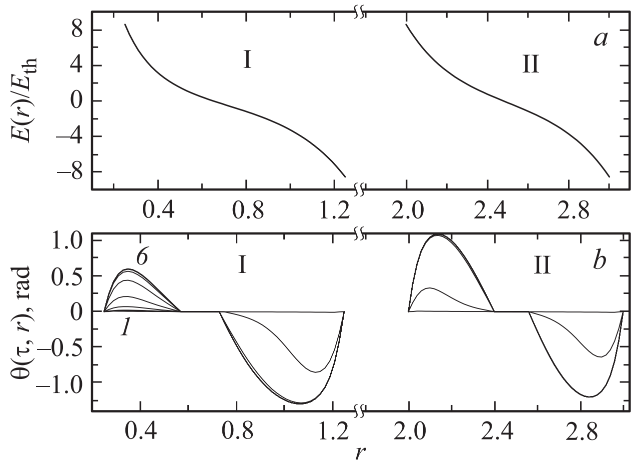

Рис. 1. a — распределение безразмерного электростатического поля $E(r)/E_{\text{th}}$ по сечению ЖК-полости, обусловленное поверхностной плотностью заряда $\sigma = 4\cdot 10^{-3}\,\text{C/m}^2$ для случая двух геометрий, соответствующих вариантам I и II. b — эволюция угла $\theta(\tau, r)$ к его равновесному распределению $\theta_{eq}(r)$ вдоль радиуса r для случая слабого сцепления ЖК-молекул с цилиндрами ($\mathscr{D} = 0.1$) и двух геометрий I и II соответственно. Распределение $\theta_{eq}(r)$ достигается спустя $\tau_6 = 0.5$ $(\sim 0.3\,\mu\text{s})$ единиц безразмерного времени.

рия)) и 2.0 (вариант II (менее искривленная геометрия)) соответственно, в то время как на рис. 1, *b* представлены результаты расчета эволюции угла $\theta(\tau, r)$ к его равновесному распределению $\theta_{eq}(r)$ вдоль радиуса r, полученные методом релаксации [16], для случая слабого сцепления ЖК-молекул с цилиндрами ($\mathscr{D} = 0.1$), которое достигается спустя $\tau_6 0.5$ ($\sim 0.3\,\mu$s) единиц безразмерного времени. Здесь время отсчитывается с момента начала разогрева внутреннего цилиндра. Условием сходимости итерационной процедуры была выбрана величина $\epsilon = |(\theta_{(m+1)}(\tau, r) - \theta_{(m)}(\tau, r))/\theta_{(m)}(\tau, r)| \sim 10^{-4}$, и итерационная процедура продолжалась вплоть до достижения заданной точности $\epsilon \sim 10^{-4}$. Здесь m — число итераций. Кривые *1–6* на рис. 1, *b* соответствуют временам $\tau_1 = 0.016$ (кривая *1*), $\tau_2 = 0.03$ (кривая *2*), $\tau_3 = 0.06$ (кривая *3*), $\tau_4 = 0.13$ (кривая *4*), $\tau_5 = 0.25$ (кривая *5*) и $\tau_6 = 0.5$ (кривая *6*) соответственно. Результаты расчетов показывают, что при фиксированном зазоре $d = 0.2\,\mu$m между двумя коаксиально расположенными цилиндрами влияние электростатического поля ограничивается приповерхностными областями $0.25 \le r \le 0.56$ и $0.73 \le r \le 1.25$ (вариант I (более искривленная геометрия)) и $2.0 \le r \le 2.4$ и $2.56 \le r \le 3.0$ (вариант II (менее искривленная геометрия)) соответственно.

Таким образом, внутренняя часть ЖК-полости остается недеформированной, т. е. планарно-ориентированной. Эволюция как безразмерного поля температуры $\chi(\tau, r)$, так и поля скорости $u(\tau, r)$ по сечению ЖК-полости в процессе нагревания внутреннего цилиндра, когда в объем ЖК-фазы был направлен поток тепла $Q = 0.04$ ($\sim 12\,\mu$W/μm^2) с поверхности внутреннего цилиндра, в то время как на поверхности внешнего цилиндра поддерживалась постоянная температура $\chi_{r=a+1} = \chi_{\text{out}} = 0.97$, представлена на рис. 2 и 3 соответственно. Кривые *1–5*, на рис. 2 и 3 соответствуют временам $\tau_1 = 0.0008$ (кривая *1*), $\tau_2 = 0.004$ (кривая *2*), $\tau_3 = 0.02$ (кривая *3*), $\tau_4 = 0.1$ (кривая *4*) и $\tau_5 = 0.5$ (кривая *5*) соответственно. Прежде всего следует отметить, что в течении первых трех интервалов безразмерного времени $\tau \in [\tau_1, \tau_3]$ прогревались только области прилегающие к внутреннему цилиндру $0.25 \le r \le 0.7$ (в случае I) и $2.0 \le r \le 2.5$ (в случае II) соответственно. Так, в случае I и двух способов сцепления ЖК-молекул с ограничивающими цилиндрами, сильного (S) и слабого (W) ($\mathscr{D} = 0.1$), температураχ на границе раздела ЖК-фаза/твердое тело, за время $\tau = \tau_5 = 0.5$ ($\sim 0.3\,\mu$s), поднялась в случае (S) — с 0.97 (~ 298 K) до 0.986 (~ 303 K), а в случае (W) — с 0.97 (~ 298 K) до 0.985 (~ 302.6 K) соответственно. В свою очередь, в случае II и при тех же граничных условиях, температура разогрева внутреннего цилиндра была несколько выше, а именно она возросла с 0.97 (~ 298 K) до 0.998 (~ 306.6 K). Такой характер прогревания ЖК-полости в течении первых $\tau = 0.5$ ($\sim 0.3\,\mu$s) единиц времени создает предпосылки для формирования горизонтального потока ЖК-материала сначала исключительно вблизи внутреннего цилиндра (см. рис. 3), как в случае I, так и в случае II, с последующим вовлечением в поток все большего объема ЖК-полости. Такое формирование гидродинамического потока продиктовано тем, что градиент температуры в течении первых $\tau = 0.5$ ($\sim 0.3\,\mu$s) единиц времени сформировался исключительно вблизи внутреннего цилиндра. Основываясь на результатах вычислений можно сделать заключение, что кривизна цилиндров играет существенную роль в формировании величины скорости гидродинамического потока только в случае сильного сцепления ЖК-молекул с ограничивающими цилиндрами (см. рис. 3, *a*).

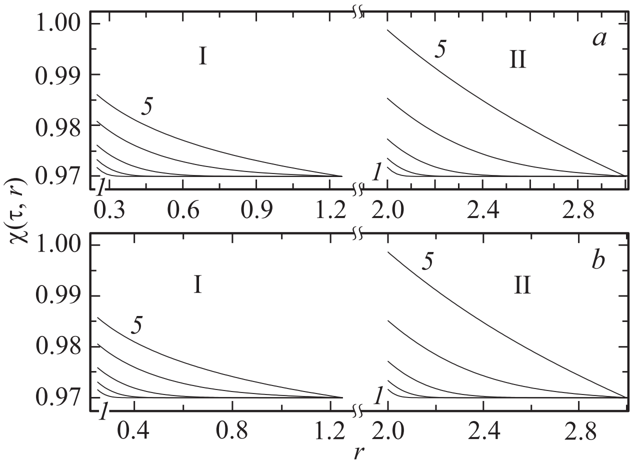

Рис. 2. Эволюция безразмерного поля температуры $\chi(\tau, r)$ по сечению ЖК-полости в процессе нагревания внутреннего цилиндра, когда в объем ЖК-фазы был направлен поток тепла $Q = 0.04$ ($\sim 12\,\mu$W/μm^2) с поверхности внутреннего цилиндра, в то время как на поверхности внешнего цилиндра поддерживалась постоянная температура $\chi_{r=a+1} = -\chi_{\text{out}} = 0.97$. Кривые *1–5* соответствуют временам $\tau_1 = 0.0008$ (кривая *1*), $\tau_2 = 0.004$ (кривая *2*), $\tau_3 = 0.02$ (кривая *3*), $\tau_4 = 0.1$ (кривая *4*) и $\tau_5 = 0.5$ (кривая *5*) соответственно. Случаи (*a*) и (*b*) соответствуют сильному (S) и слабому (W) сцеплению ЖК-молекул с ограничивающими цилиндрами соответственно.

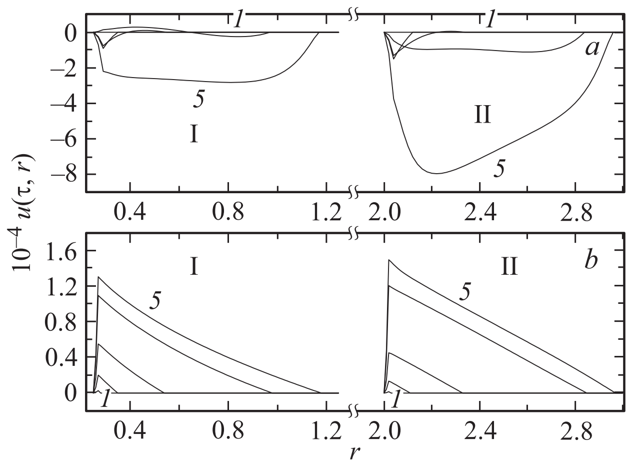

Рис. 3. То же, что на рис. 2, но представлена эволюция распределения скорости $u(\tau, r)$ по сечению ЖК-полости в процессе ее прогревания.

Другой фактор, который сильно влияет на характер гидродинамического потока, это способ сцепления ЖК-молекул с цилиндрами. Так, в случае I и (S) наибольшая величина скорости потока направленного в отрицательном направлении равна $u_{\max}(\mathrm{I, S}) \sim 3 \cdot 10^{-4}$ ($\sim 120\,\mu$m/s), в то время как в случае II и (S), $u_{\max}(\mathrm{II, S}) \sim 8 \cdot 10^{-4}$ ($\sim 320\,\mu$m/s), т.е. практически в 2.6 раза больше (см. рис. 3, *a*). Картина гидродинамического течения координально меняется с изменением характера сцепления ЖК-молекул с ограничивающими цилиндрами. Так, в случае I и (W) наибольшая величина скорости потока направленного в положительном направлении равна $u_{\max}(\mathrm{I, W}) \sim 1.3 \cdot 10^{-4}$ ($\sim 62\,\mu$m/s), в то время как в случае II и (W) $u_{\max}(\mathrm{II, W}) \sim 1.6 \cdot 10^{-4}$ ($\sim 76\,\mu$m/s) (см. рис. 3, *b*).

После прекращения разогрева внутреннего цилиндра ($\tau > 0.5$ ($\sim 0.3\,\mu$s)) начался процесс охлаждения ЖК-материала и равномерное распределение поля температуры по сечению ЖК-полости, соответствующее $\chi_{\text{out}} = 0.97$, установилось спустя время $\tau_9 - \tau_{12}$ (см. рис. 4, *a* и *b*). Так, в случае (I) и (S) время необходимое для выравнивания поля температуры по сечению ЖК-полости равно $\tau_R(\mathrm{I, S}) = \tau_{10} = 1.2$ ($\sim 0.72\,\mu$s), в то время как в случае (II) и (S) $\tau_R(\mathrm{II, S}) = \tau_{12} = 1.6$ ($\sim 0.96\,\mu$s). В случае слабого сцепления ЖК-молекул с ограничивающими цилиндрами (W) время необходимое для выравнивания поля температуры по сечению ЖК-полости равно $\tau_R(\mathrm{I, W}) = \tau_9 = 1.0$ ($\sim 0.60\,\mu$s), в то время как в случае (II) и (W) $\tau_R(\mathrm{II, W}) = \tau_{10} = 1.2$ ($\sim 0.72\,\mu$s) соответственно. Здесь время отсчитывается по прежнему с момента начала разогрева внутреннего цилиндра.

Таким образом, результаты расчетов свидетельствуют о том, что на скорость остывания ЖК-полости характер сцепления ЖК-молекул с ограничивающими цилиндрами практически не влияет. Эволюция поля скорости $u(\tau, r)$ по сечению ЖК-полости в процессе охлаждения ЖК-материала, для обоих вариантов сцепления ЖК-молекул с ограничивающими цилиндрами, представлена на рис. 5, *a* и *b*. Так, для случая (I) и (S) движение ЖК-материала прекратилось спустя время $\tau_R(\mathrm{I, S}) = \tau_{10} = 1.2$ ($\sim 0.72\,\mu$s), в то время как в случае (II) и (S) — $\tau_R(\mathrm{II, S}) = \tau_{12} = 1.6$ ($\sim 0.96\,\mu$s) соответственно (см. рис. 5, *a*). В случае слабого сцепления ЖК-молекул с ограничивающими цилиндрами (W) движение ЖК-материала прекратилось спустя время $\tau_R(\mathrm{I, W}) = \tau_{10} = 1.2$ ($\sim 0.72\,\mu$s), в то время как в случае (II) и (W) — $\tau_R(\mathrm{II, W}) = \tau_{12} = 1.6$ ($\sim 0.96\,\mu$s) соответственно (см. рис. 5, *b*).

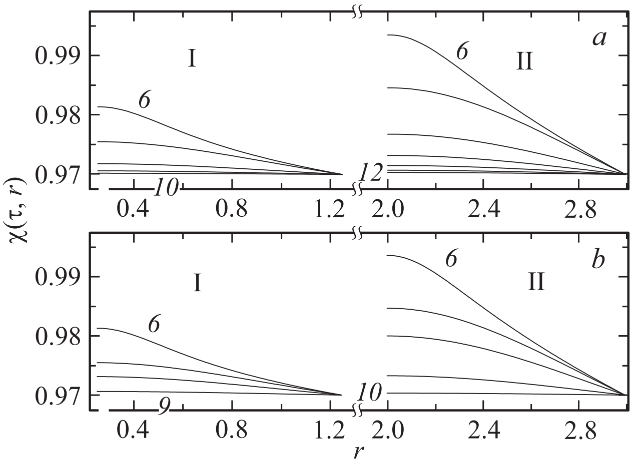

Рис. 4. То же, что на рис. 2, но представлена эволюция безразмерного поля температуры $\chi(\tau, r)$ по сечению ЖК-полости в процессе ее охлаждения для следующих моментов времени: $\tau_6) = 0.51$ (кривая *6*), $\tau_7 = 0.6$ (кривая *7*), $\tau_8 = 0.8$ (кривая *8*), $\tau_9 = 1.0$ (кривая *9*), $\tau_{10} = 1.2$ (кривая *10*), $\tau_{11} = 1.4$ (кривая *11*) и $\tau_{12} = 1.6$ (кривая *12*) соответственно.

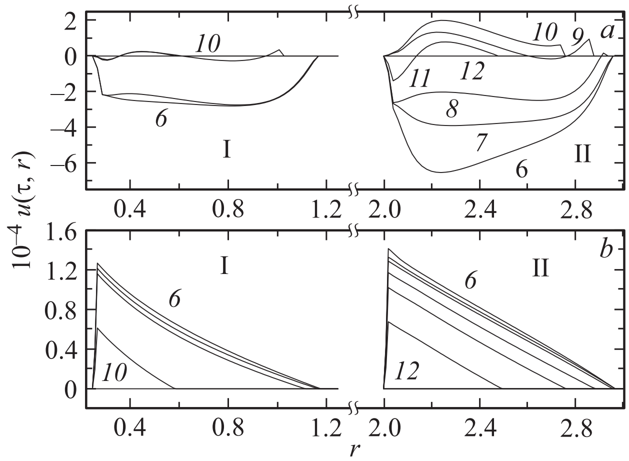

Рис. 5. Эволюция распределения скорости $u(\tau, r)$ по сечению ЖК-полости в процессе ее охлаждения. Времена те же, что на рис. 4.

Таким образом, основываясь на результатах вычислений можно предположить, что геометрия капилляра в случае сильного сцепления ЖК-молекул с ограничивающими цилиндрами сильно влияет на формирование поля скорости в однородно ориентированной ЖК-полости. В то же время, в случае слабого взаимодействия ЖК-молекул с ограничивающими цилиндрами геометрия капилляра практически не влияет на характер и величину гидродинамического потока формирующегося в ЖК-полости под действием градиента температуры и электростатического поля инициируемого двойным электрическим слоем.

Следует также отметить, что дальнейшее увеличение теплового потока, например в 10 раз, с $Q = 0.04$ ($\sim 12\,\mu\mathrm{W}/\mu\mathrm{m}^2$) до $Q = 0.4$ ($\sim 120\,\mu\mathrm{W}/\mu\mathrm{m}^2$), приведет к резкому разогреву внутреннего цилиндра и, как следствие, скорость гидродинамического потока резко возрастет только вблизи нагретого внутреннего цилиндра, в то время как остальной объем ЖК-полости останется неподвижным. Таким образом, необходимо соблюдать баланс теплового потока с тем, чтобы все время находиться в температурном интервале существования ЖК-фазы.

4. Заключение

В предлагаемой работе представлено исследование переориентации поля директора $\hat{\mathbf{n}}(\tau, r)$, описываемое углом $\theta(\tau, r)$, перераспределение поля температуры $\chi(\tau, r)$ и формирование горизонтального потока $u(\tau, r)$ в ЖК-полости между двумя коаксиальными цилиндрами под действием градиента температуры и под влиянием электростатического поля возникающего за счет двойного электрического слоя на границе раздела ЖК-фаза/твердое тело. Численные расчеты выполненные в рамках нелинейного обобщения классической теории Эриксе-на-Лесли показали, что при определенных соотношениях моментов и импульсов действующих на единицу объема однородно ориентированной ЖК-полости в последней формируется горизонтально направленный поток. Было показано, что на начальной стадии прогревания ЖК-полости скорость ЖК-фазы возрастает только вблизи нагретого внутреннего цилиндра, в то время как остальной объем ЖК-полости остается неподвижным. Дальнейший процесс прогревания ЖК-полости ведет к тому, что в движение приходит и остальная часть ЖК-полости. Результаты расчетов показали, что на величину и направление гидродинамического потока влияют геометрия капилляра и характер сцепления ЖК-молекул с ограничивающими цилиндрами. Для выбранной толщины ЖК-полости капилляра ($\sim 0.2\,\mu$m) умеренное количество тепла ($\sim 12\,\mu$W/μm^2), направленное изнутри в ЖК-полость, в сочетании с оценками длительности потоков и геометрии капилляров способно осуществить транспортировку ЖК-материала на расстояние $\sim 1\,\mu$m.

Исследованные в работе особенности, связанные с реакцией ЖК-материала инкапсулированного в тонкие и сверхтонкие капилляры на локализованное воздействие градиента температуры и статического электрического поля, необходимо учитывать при создании сенсоров и датчиков используемых в биотехнологических приложениях, медицине и биометрических оптических системах.

Список литературы

[1] R.B. Shock J.Y. Han, P. Remind. Rev. Mod. Rhys. **80**, 839 (2008).
[2] W. Sparreboom, A. van den Berg, J.C.T. Eijkel. New. J. Phys. **12**, 0115004 (2010).
[3] P. Popov, L.W. Hanaker, M. Mirheydari, E.K. Mann, A. Jakli. Sci. Rep. **7**, 1603 (2017).
[4] J. Beeckmann, I. Nys, O. Willekens, K. Neyts. J. Appl. Phys. **121**, 023106 (2017).
[5] K. Asatryan, V. Presnyakov, A. Tork, A. Zohrabyan, A. Bagramyan, T. Galstian. Opt. Express **18**, 13981 (2010).
[6] H.C. Lin, Y.H. Lin. Opt. Express **20**, 2045 (2012).
[7] A.V. Zakharov, A.A. Vakulenko. Phys. Fluids **27**, 062001 (2015).
[8] A.V. Zakharov, P.V. Maslennikov. Phys. Rev. E **96**, 052705 (2017).
[9] A.Yu. Malyuk, N.A. Ivanova. Appl. Phys. Lett. **112**, 103701 (2018).
[10] A.V. Zakharov, A.A. Vakulenko. J. Chem. Phys. **127**, 084907 (2007).
[11] J.N. Israellachvili. Intermolecular and Surface Forces. Academic Press, London (1992). 450 p.
[12] J.L. Ericksen. Arch. Ration. Mech. Anal. **4**, 231 (1960).
[13] F.M. Leslie. Arch. Ration. Mech. Anal. **28**, 265 (1968).
[14] R.S. Akopyan, R.B. Alaverdian, E.A. Santrosian, Y.S. Chilingarian. J. Appl. Phys. **90**, 3371 (2001).
[15] A.V. Zakharov, A.A. Vakulenko. Phys. Rev. E **80**, 031708 (2009).
[16] И.С. Березин, Н.Р. Жидков. Методы вычислений. Физматгиз, М. (1964). 464 с.

Редактор Т.Н. Василевская