

ВЛИЯНИЕ ТЕМПЕРАТУРЫ НА ОРИЕНТАЦИОННУЮ ДИНАМИКУ ОСЦИЛЛИРУЮЩЕГО ПУАЗЕЙЛЕВСКОГО ТЕЧЕНИЯ НЕМАТИЧЕСКОГО ЖИДКОГО КРИСТАЛЛА

Насибуллаев И. Ш., Камалетдинова Ю. Р.

Уфимский государственный авиационный технический университет, Уфа

Аннотация. В работе изучается влияние температуры и характера поверхностного сцепления на ориентационное поведение осциллирующего пуазейлевского течения нематического жидкого кристалла (НЖК) в плоском канале. Равновесное распределение длинных осей молекул НЖК лежит в плоскости течения. Исследуется изменение ориентации молекул НЖК и вызываемые этим обратные течения с помощью малоамплитудного разложения.

1. Введение

Термотропные жидкие кристаллы представляют собой состояние вещества, промежуточное на температурной шкале между твердым телом и жидкостью (мезофаза). Они совмещают свойства пограничных фаз: текут как жидкости, но имеют анизотропию ряда физических свойств как твердые тела. Совмещение этих свойств приводит к ряду интересных явлений, в том числе и при наличии границы между жидким кристаллом и твердой поверхностью.

Влияние поверхности на ориентационную динамику и течение нематического жидкого кристалла (НЖК) [1] может быть значительным, особенно в тонких ($\sim 10 \div 100$ мкм), ограниченных твердой поверхностью, пленках НЖК [2]. С другой стороны,

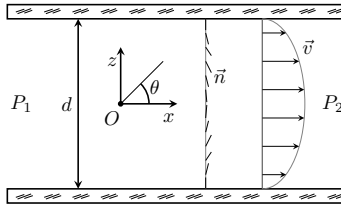


Рис. 1. Геометрия НЖК-ячейки

ориентационные свойства НЖК зависят от материальных параметров (коэффициенты вязкости Лесли и коэффициенты упругости Франка), которые, в свою очередь, зависят от температуры [3, 4]. Однако, это влияние до сих пор остается малоизученным.

2. Математическая модель

Рассматривается слой НЖК толщиной d , заключенный между двумя бесконечными параллельными пластинами, обеспечивающими нежесткое сцепление. Осциллирующий пуазейлевский поток создается периодически изменяющимся во времени, приложенным вдоль оси x , перепадом давления $\Delta P = P_2 - P_1$ (рис. 1). В отсутствие потока при слабом сцеплении директор (средняя локальная ориентация молекул) ориентирован гомеотропно (т.е. перпендикулярно подложкам вдоль оси z).

Рассматривается ориентация директора в плоскости течения

$$\vec{n} = \{n_x(z, t), 0, n_z(x, t)\}.$$

Это условие выполняется для малых скоростей течения, когда не появляются неустойчивости, сопровождающиеся выходом директора из плоскости течения [5]. Кроме того, длина вектора \vec{n} равна единице и направления \vec{n} и $-\vec{n}$ эквивалентны:

$$\vec{n}^2 = 1. \tag{1}$$

Для несжимаемой жидкости скорость имеет только одну отличную от нуля компоненту — $v_x(z, t)$.

Система уравнений, описывающих рассматриваемую задачу, состоит из условия нормировки (1), уравнения Навье–Стокса и уравнения баланса моментов сил, действующих на директор:

$$\begin{aligned} \rho v_{x,t} = -p_{,x} + \left[\alpha_2 n_z n_{x,t} + \alpha_3 n_x n_{z,t} + \right. \\ \left. + \frac{1}{2} \left(\alpha_4 + (\alpha_5 - \alpha_2) n_z^2 + (\alpha_3 + \alpha_6 + 2\alpha_1 n_z^2) n_x^2 \right) v_{x,z} \right]_{,z}, \quad (2) \\ K_{33} n_z n_{x,zz} - K_{11} n_x n_{z,zz} = n_z (\gamma_1 n_{x,t} - \alpha_2 n_z v_{x,z}) - \\ - n_x (\gamma_1 n_{z,t} + \alpha_3 n_x v_{x,z}), \end{aligned}$$

где через $f_{,x} = \partial f / \partial x$ — обозначены частные производные; ρ — плотность НЖК; α_i — коэффициенты вязкости Лесли; K_{ii} — коэффициенты упругости Франка, коэффициент вращательной вязкости $\gamma_1 = \alpha_3 - \alpha_2$.

Граничные условия для компоненты скорости v_x определяются из условия прилипания

$$v_x(z = \pm d/2) = 0. \quad (3)$$

Граничные условия для ориентации директора задаются уравнением [6]:

$$\pm \frac{\partial F}{\partial n_{i,z}} + \frac{\partial F_s}{\partial n_i} + \eta_s \frac{\partial n_i}{\partial t} = 0, \quad (4)$$

где знаки « \pm » соответствуют границе $z = \pm d/2$; F — объемная плотность свободной энергии; F_s — поверхностная плотность свободной энергии.

Перейдем к безразмерным величинам. В качестве характерного размера выберем толщины слоя НЖК-ячейки d , в качестве характерного времени — обратную величину частоты потока $1/\omega$ ($\omega = 2\pi f$). Угол отклонения ориентации директора от оси Oz обозначим через θ . Тогда компоненты директора примут вид $\vec{n} = \{\cos \theta, 0, \sin \theta\}$ и условие нормировки (1) выполняется автоматически.

Для малых отклонений директора θ_1 от состояния равновесия $\theta = \pi/2$ запишем разложение

$$\theta(z, t) = \theta_0(z, t) + \theta_1(z, t).$$

Линеаризованные относительно малых отклонений директора θ_1 уравнения (2) в безразмерном виде примут вид:

$$\begin{aligned} Rv_{x,t} - a_p \cos t - (1 - \lambda)K_0\theta_{1,tz} + Q_0v_{x,zz}, \\ \theta_{1,t} - K_0v_{x,z} = \varepsilon P_0\theta_{1,zz}, \end{aligned} \quad (5)$$

где

$$\begin{aligned} K_0 = K(\theta_0), P_0 = P(\theta_0), Q_0 = Q(\theta_0), R = \tau_v\omega, \tau_v = \frac{\rho d^2}{-\alpha_2}, \\ K(\theta) = \frac{\lambda \cos^2 \theta - \sin^2 \theta}{1 - \lambda}, P(\theta) = \cos^2 \theta + K_{31} \sin^2 \theta, K_{31} = \frac{K_{33}}{K_{11}}, \\ Q(\theta) = \frac{\alpha_4 + (\alpha_5 - \alpha_2) \sin^2 \theta + (\alpha_3 + \alpha_6 + 2\alpha_1 \sin^2 \theta) \cos^2 \theta}{2(-\alpha_2)}, \\ \lambda = \frac{\alpha_3}{\alpha_2}, a_p = \frac{\Delta P}{L} \frac{d}{(-\alpha_2)\omega}, \varepsilon = \frac{1}{\tau_d\omega}, \tau_d = \frac{\gamma_1 d^2}{K_{11}}, \gamma_1 = \alpha_3 - \alpha_2, \end{aligned}$$

где a_p — безразмерная амплитуда пуазейлевского потока; $\Delta P = P_2 - P_1$ — перепад давления; L — длина НЖК-ячейки. Величины τ_d и τ_v представляют собой характерные времена релаксации ориентации директора и скорости, соответственно. Инерциальное слагаемое скорости (правая часть первого уравнения (5)) содержит множитель R — число Рейнольдса, которое, в рассматриваемой задаче ($\rho \approx 10^3$ кг/м³, $d = 20$ мкм, $-\alpha_2 \sim 0,1$ Па·сек) является малой величиной для частот потока $f \ll 10^4$ Гц и, в дальнейших расчетах, этим слагаемым можно пренебречь.

Поверхностную плотность свободной энергии запишем в виде потенциала Рабини [7] $F_s = (W/2)\theta_1^2$, где W — поверхностная энергия. С учетом этого граничные условия (3), (4) в безразмерном виде примут вид:

$$v_x(z = \pm 1/2) = 0, \quad \pm\theta_{1,z} - E\theta_1 - G\theta_{1,t} = 0, \quad (6)$$

где

$$E = \frac{Wd}{P_0 K_{11}}, \quad G = \frac{\eta_s \omega d}{P_0 K_{11}}$$

— безразмерные коэффициенты, определяющие влияние поверхностной энергии W и поверхностной вязкости $\eta_s = \gamma_1 \ell_{\gamma_1}$, соответственно. Величина ℓ_{γ_1} — ширина приграничного слоя, в котором заметно влияние поверхностной вязкости.

Так как уравнения (5) линейны относительно θ_1 и v_x , то решение ищем в виде линейного отклика:

$$\begin{aligned} \theta_1(z, t) &= a_p [T_1(z) \cos t + T_2 \sin t], \\ v(z, t) &= a_p [U_1(z) \cos t + U_2 \sin t]. \end{aligned} \quad (7)$$

С учетом граничных условий (6) были найдены функции $T_1(z)$, $T_2(z)$, $U_1(z)$ и $U_2(z)$:

$$\begin{aligned} T_1(z) &= -K_0 M_0 \frac{c_1 f_1(z) - c_2 f_2(z)}{c_1^2 + c_2^2}, \\ T_2(z) &= -K_0 M_0 \left(\frac{c_2 f_1(z) + c_1 f_2(z)}{c_1^2 + c_2^2} - 2z \right), \\ U_1(z) &= -M_0 \left(\frac{1}{4} - z^2 + \frac{(1-\lambda)K_0^2}{2Q_0 k} \frac{c_1 f_3(z) - c_2 f_4(z)}{c_1^2 + c_2^2} \right), \\ U_2(z) &= -M_0 \left(\frac{(1-\lambda)K_0^2}{2Q_0 k} \frac{c_2 f_3(z) + c_1 f_4(z)}{c_1^2 + c_2^2} \right), \end{aligned}$$

где

$$\begin{aligned} k &= \sqrt{\frac{Q_0 - (1-\lambda)K_0^2}{2\varepsilon Q_0 P_0}}, \quad M_0 = \frac{1}{2(Q_0 - (1-\lambda)K_0^2)}, \\ f_1(z) &= \operatorname{ch}(kz) \sin(kz) + \frac{2E}{E^2 + G^2} \operatorname{ch}(kz) \sin(kz) - \frac{2G}{E^2 + G^2} \operatorname{sh}(kz) \cos(kz), \\ f_2(z) &= \operatorname{sh}(kz) \cos(kz) + \frac{2E}{E^2 + G^2} \operatorname{sh}(kz) \cos(kz) + \frac{2G}{E^2 + G^2} \operatorname{ch}(kz) \sin(kz), \\ f_3(z) &= A_1(z) \left(1 + 2 \frac{E - G}{E^2 + G^2} \right) + A_2(z) \left(1 + 2 \frac{E + G}{E^2 + G^2} \right), \end{aligned}$$

$$f_4(z) = A_1(z) \left(1 + 2 \frac{E + G}{E^2 + G^2} \right) - A_2(z) \left(1 + 2 \frac{E - G}{E^2 + G^2} \right),$$

$$A_1(z) = \operatorname{ch}(kz) \cos(kz) - \operatorname{ch}(k/2) \cos(k/2),$$

$$A_2(z) = \operatorname{sh}(kz) \sin(kz) - \operatorname{sh}(k/2) \sin(k/2),$$

$$c_1 = \operatorname{sh}(k/2) \cos(k/2) + \frac{kE}{E^2 + G^2} \left(\operatorname{ch}(k/2) \cos(k/2) - \operatorname{sh}(k/2) \sin(k/2) \right) +$$

$$+ \frac{kE}{E^2 + G^2} \left(\operatorname{ch}(k/2) \cos(k/2) + \operatorname{sh}(k/2) \sin(k/2) \right),$$

$$c_2 = \operatorname{ch}(k/2) \sin(k/2) + \frac{kE}{E^2 + G^2} \left(\operatorname{ch}(k/2) \cos(k/2) + \operatorname{sh}(k/2) \sin(k/2) \right) -$$

$$- \frac{kE}{E^2 + G^2} \left(\operatorname{ch}(k/2) \cos(k/2) + \operatorname{sh}(k/2) \sin(k/2) \right).$$

Для расчетов использовались следующие параметры: толщина слоя $d = 20$ мкм, частота потока $f = 0,5 \div 5$ Гц, плотность поверхностной энергии $W = 10^{-6}$ Дж/м², материальные параметры НЖК МББА [3, 4] для всей температурной области существования мезофазы. На границе рассматривается гомеотропное сцепление $\theta_0 = \pi/2$.

Результаты расчетов профилей для компонент директора $T_1(z)$, $T_2(z)$ и скорости $U_1(z)$, $U_2(z)$ для различных температур $T = 20 \dots 44^\circ$ С представлены на рис. 2–4. На рис. 2 профили построены для значения длины поверхностной вязкости $\ell_{\gamma_1} = 10^{-5}$ м, что соответствует жесткому сцеплению молекул НЖК с подложкой. На границе отклонения ориентации директора равны нулю, т.е. ориентация молекул НЖК остается гомеотропной.

Отметим, что с ослаблением поверхностного сцепления (уменьшением ℓ_{γ_1}), сдвиг фазы (отношение между максимумами отклонений между компонентами $T_1(z)$ и $T_2(z)$) уменьшается. Это объясняется тем, что при слабом сцеплении молекул НЖК с подложкой влияние поверхностной вязкости проявляется в меньшем приграничном слое (ширина слоя порядка ℓ_{γ_1}) и требуется меньше энергии для изменения ориентации директора.

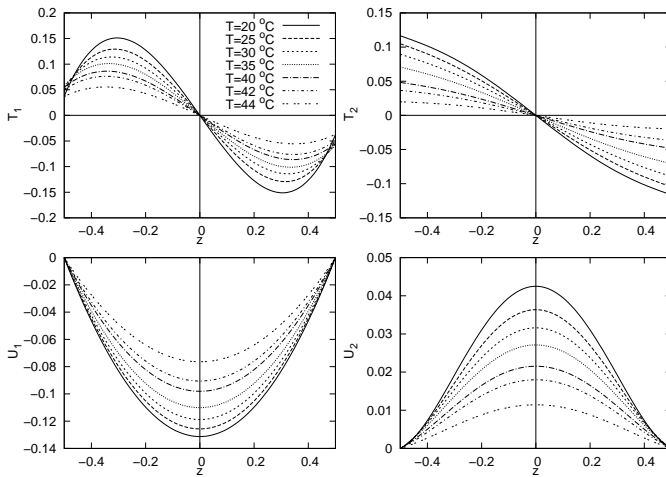


Рис. 2. Профили $T_1(z)$, $T_2(z)$ и $U_1(z)$, $U_2(z)$ для различных температур T . $f = 0,5$ Гц; $W = 10^{-6}$ Дж/м²; $\ell_{\gamma_1} = 10^{-5}$ м

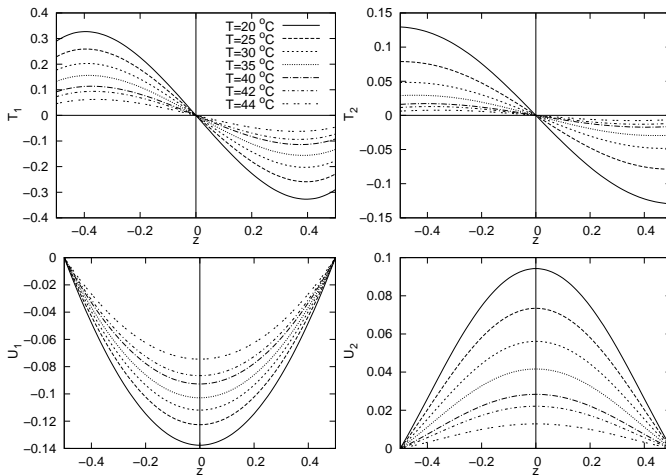


Рис. 3. Профили $T_1(z)$, $T_2(z)$ и $U_1(z)$, $U_2(z)$ для различных температур T . $f = 0,5$ Гц; $W = 10^{-6}$ Дж/м²; $\ell_{\gamma_1} = 10^{-6}$ м

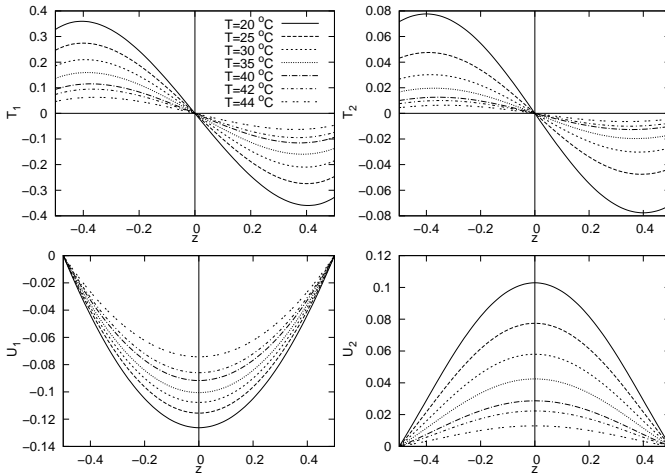


Рис. 4. Профили $T_1(z)$, $T_2(z)$ и $U_1(z)$, $U_2(z)$ для различных температур T . $f = 0,5$ Гц; $W = 10^{-6}$ Дж/м²; $\ell_{\gamma_1} = 10^{-7}$ м

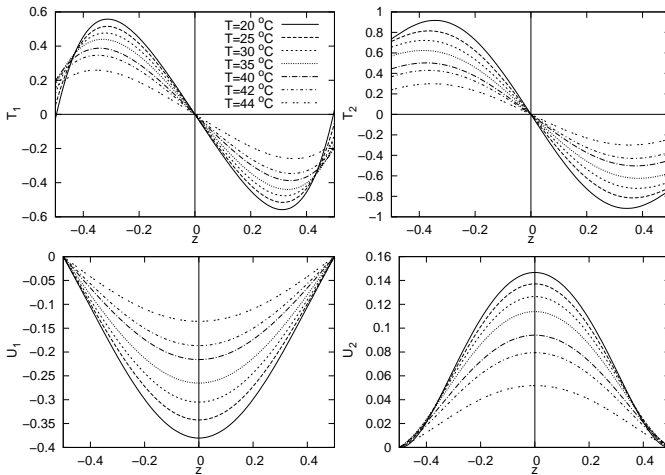


Рис. 5. Профили $T_1(z)$, $T_2(z)$ и $U_1(z)$, $U_2(z)$ для различных температур T . $f = 5$ Гц; $W = 10^{-6}$ Дж/м²; $\ell_{\gamma_1} = 10^{-6}$ м

С увеличением частоты потока (скорости течения) увеличивается амплитуда отклонения директора (из-за связи ориентации молекул НЖК с их скоростью) и увеличивается сдвиг фазы осцилляций (изменение ориентации молекул НЖК отстает от изменения скорости течения). Это видно из сравнения рис. 3 ($f = 0, 5$ Гц) и 5 ($f = 5$ Гц).

С ростом температуры уменьшается сдвиг фазы осцилляций ориентации директора. Это объясняется зависимостью величины характерного времени релаксации директора $\tau_d = \gamma_1 d^2 / K_{11}$ от температуры (через вязкости Лесли α_2 и α_3 входящие в γ_1 и коэффициент упругости K_{11}) — с ростом температуры τ_d уменьшается и молекулы при том же ориентационном искажении быстрее релаксируют к равновесной конфигурации.

Скорость также испытывает сильное влияние температуры. Это связано с двумя факторами: амплитуда скорости обратно пропорциональна эффективной вязкости НЖК Q_0 , а значит чувствительна к изменению коэффициентов вязкости Лесли при изменении температуры; скорость связана с полем директора. Отметим, что первый фактор оказывает наибольшее влияние, т.к. входит как амплитуда при параболическом профиле скорости (слагаемые в $U_2(z)$) в приближении изотропной жидкости с вязкостью Q_0 . Второй фактор может повлиять на форму профиля скорости, т.к. является поправкой, зависящей от профиля директора (компонента $U_1(z)$ без параболических слагаемых и компонента $U_2(z)$). Например, при жестком сцеплении ориентация директора вблизи границы резко меняется и это приводит к искажению формы профиля скорости и образованию пограничного слоя (от границы до первой точки перегиба).

Отметим два важных момента относительно используемой математической модели. Во-первых, уравнения (5) и решения (7) соответствуют и равновесной планарной (т.е. вдоль оси Ox) ориентации директора на границе, если во всех коэффициентах, зависящих от θ_0 подставить значение $\theta_0 = 0$. Во-вторых, мы использовали малоамплитудное разложение только для директора. Так как коэффициенты при скорости зависят от θ квадратично, и

при линеаризации по θ_1 обращаются в константы, линеаризованные уравнения становятся линейными и относительно скорости автоматически.

3. Заключение

В работе было изучено влияние температуры на ориентационную динамику НЖК в осциллирующем пуазейлевском потоке со слабым поверхностным сцеплением. Было получено, что влияние температуры значительно как на величину отклонения ориентации директора от начальной ориентации, так и на положение максимума отклонения директора внутри слоя и на сдвиг по фазе относительно внешнего воздействия. Было найдено, что влияние температуры значительно и на величину скорости течения и форму профиля скорости (наличие или отсутствие приграничного слоя).

Список литературы

- [1] де Жен П. Физика жидких кристаллов. М.: Мир, 1977. 400 с.
- [2] Насибуллаев И. Ш., Крехов А. П. Поведение нематического жидкого кристалла в осциллирующем потоке при слабом поверхностном сцеплении // Кристаллография. Том. 46, № 3. 2001. С. 540–548.
- [3] Wang H. Wu Th. X. Gauza S. et al. A method to estimate the Leslie coefficients of liquid crystals based on MBBA data // Liquid Crystals. Vol. 33, № 1. 2006. С. 91–98.
- [4] Leenhouts F. Dekker A.J. Elastic constants of nematic liquid crystalline Schiff's bases // J. Chem. Phys. Vol. 74, № 3. 1981. С. 1956–1965.
- [5] Pasechnik S.V., Shmeliova D.V., Tsvetkov V.A., Krekhov A.P., Nasibullayev I.Sh. Orientational dynamics in nematic liquid crystal under decay poiseuille flow // Mol. Cryst. Liq. Cryst. V. 409. 2001. Pp. 467–474.
- [6] Kedney P. J., Leslie F. M. Switching in a simple bistable nematic cell // Liq. Cryst. V. 24. I. 9. 1998. Pp. 613–618.
- [7] Rapini A., Papoular M. Distorsion d'une lamelle nématique sous champ magnétique conditions d'ancrage aux parois // Liq. Cryst. V. 24. I. 9. 1998. Pp. 613–618.