

Влияние температуры на однородные неустойчивости в стационарном сдвиговом потоке нематического жидкого кристалла с нежестким граничным сцеплением

Насибуллаев И.Ш., Юрина О.В.

Уфимский государственный авиационный технический университет, Уфа

Аннотация. Рассматривается плоское стационарное сдвиговое течение нематического жидкого кристалла (НЖК) с нежестким сцеплением молекул НЖК с ограничивающими твердыми поверхностями. Исследуется влияние температуры, внешних полей и характера поверхностного сцепления на образование ориентационных неустойчивостей.

1. Введение

Жидкие кристаллы (ЖК) являются промежуточной фазой (мезофазой) между кристаллом и жидкостью [1]. Как твердые тела ЖК обладают анизотропией ряда физических свойств, а как обычные жидкости — текучестью. Результатом этого является высокая чувствительность к внешним воздействиям (внешние электрические и магнитные поля, влияние ограничивающей поверхности). Нематические жидкие кристаллы представляют собой простейшую анизотропную жидкость, что позволяет использовать их в качестве модельного приближения при изучении структурообразования в диссипативных системах.

Стационарный сдвиговой поток НЖК с начальной ориентацией директора (средней локальной ориентации молекул НЖК)



Рис. 1. Геометрия НЖК-ячейки

перпендикулярной плоскости потока исследовался теоретически [2] и экспериментально [3] для жестких граничных условий (фиксированная ориентация директора на ограничивающих поверхностях). Было обнаружено, что при малых амплитудах потока начальная ориентация директора оставалась устойчивой. Выше некоторого порогового значения амплитуды потока появлялась однородная неустойчивость. С увеличением дестабилизирующего магнитного поля тип неустойчивости менялся на пространственно-периодический.

2. Математическая модель

В работе рассматривается слой НЖК толщиной d, заключенный между двумя бесконечными параллельными пластинами (рис. 1). Начало декартовой системы координат помещено в центре слоя, ось z направлена перпендикулярно слою. Исследуется ориентационная устойчивость НЖК в сдвиговом стационарном потоке вдоль оси Ox от внешнего электрического (направленного перпендикулярно слою) и магнитного (направленного перпендикулярно плоскости потока Oy) полей и характера поверхностного сцепления в области температур существования нематической фазы ($T = 22 \div 46^{\circ}$ С). Начальная ориентация НЖК — перпендикулярно плоскости потока (вдоль оси Oy).

Течение НЖК описывается уравнениями Эриксена-Лесли [1]:

$$\rho\left(\frac{\partial v_i}{\partial t} + v_j \frac{\partial v_i}{\partial x_j}\right) = -p_{,i} + \frac{\partial \Sigma_{ij}}{\partial x_j}, \quad [\vec{n} \times \vec{h}^d] - [\vec{n} \times \vec{h}^e] = 0, \quad (1)$$

где

$$\Sigma_{ij} = \alpha_1 n_i n_j A_{km} n_k n_m + \alpha_2 n_i N_j + \alpha_3 n_j N_i + \alpha_4 A_{ij} + \alpha_5 n_i n_k A_{kj} + \alpha_6 A_{ik} n_k n_j,$$

$$\begin{split} A_{ij} &= \frac{1}{2} \left(\frac{\partial v_j}{\partial x_i} + \frac{\partial v_i}{\partial x_j} \right), \ N_i = \frac{\partial n_i}{\partial t} + \frac{\partial n_i}{\partial x_j} v_i + \frac{1}{2} n_j \left(\frac{\partial v_j}{\partial x_i} - \frac{\partial v_i}{\partial x_j} \right), \\ \vec{h}^d &= \gamma_1 \vec{N} + \gamma_2 A \vec{n}, \ \vec{h}^e = \varepsilon_a \varepsilon_0 (\vec{E} \vec{n}) \vec{E} + \chi_a \mu_0 (\vec{H} \vec{n}) \vec{H} + \\ &+ K_{11} \nabla \text{div} \vec{n} + K_{22} \Big\{ \left[\vec{n} \nabla (\vec{n} \text{rot} \vec{n}) \right] - 2 \text{rot} \vec{n} (\vec{n} \text{rot} \vec{n}) \Big\} + \\ &+ K_{33} \Big\{ \text{rot} \left[\vec{n} [\vec{n} \text{rot} \vec{n}] \right] - \left[\text{rot} \vec{n} [\vec{n} \text{rot} \vec{n}] \right] \Big\}, \end{split}$$

 $p_{,i}$ — компоненты градиента давления; ρ — плотность НЖК; v_i — компоненты скорости молекул; n_i — компоненты директора; α_i — коэффициенты вязкости Лесли; $\gamma_1 = \alpha_3 - \alpha_2$ и $\gamma_2 = \alpha_3 + \alpha_2$ — вращательные вязкости; K_{ii} — коэффициенты упругости Франка; ε_0 и ε_a (μ_0 и χ_a) — диэлектрическая проницаемость и анизотропия диэлектрической проницаемости (магнитная восприимчивость и анизотропия магнитной восприимчивости), соответственно.

Дополнительно к уравнениям (1) имеем условие нормировки $\vec{n}^2 = 1$ и условие неразрывности div $\vec{v} = 0$.

Граничные условия для скорости определяются условием прилипания:

$$v_0(z = -d/2) = 0, \quad v_0(z = +d/2) = V_0,$$
 (2)

где V_0 — скорость движения верхней пластины относительно неподвижной нижней.

Граничные условия на ориентацию директора определяются из условия равновесия моментов сил, действующих на директор на ограничивающей поверхности [6]:

$$\pm \frac{\partial F}{\partial(\partial n_i/\partial z)} + \frac{\partial F_s}{\partial n_i} = 0, \qquad (3)$$

где знак «±» соответствует поверхности $z = \pm d/2$; F — объемная плотность свободной энергии и F_s — поверхностная плотность свободной энергии.

3. Линейный анализ устойчивости

При малых амплитудах потока молекулы НЖК ориентированы перпендикулярно плоскости потока и скорость имеет только x компоненту:

$$\vec{n}_0 = (0, 1, 0), \ \vec{v}_0 = (v_{0x}(z), 0, 0).$$
 (4)

Решение уравнений нематодинамики (1) с граничными условиями (2) и (3) для рассматриваемой геометрии дает $v_{0x} = V_0(z/d + 1/2)$.

Выше некоторого порогового значения амплитуды потока базовое состояние НЖК теряет устойчивость и происходит структурно-ориентационный переход к новому равновесному состоянию, которое может быть найдено с помощью линейного анализа устойчивости базового состояния (4) относительно малых возмущений. Мы ограничимся исследованием однородных в плоскости x - z возмущений, поскольку в стационарном сдвиговом потоке при малых величинах внешнего магнитного поля и при любых значениях электрического поля реализуется только этот тип неустойчивости [5]. После подстановки разложения для директора и скорости

$$\vec{n}(z) = (0, 1, 0) + (n_{1x}(z), 0, n_{1z}(z)),$$

$$\vec{v}(z) = (v_{0x}(z), 0, 0) + (v_{1x}(z), v_{1y}(z), 0)$$

в уравнения (1) получим систему уравнений на однородные возмущения:

$$\begin{cases} \eta_1 v_{1y,zz} + (\eta_1 - \eta_3)(Sn_{1x}), z = 0, \\ \alpha_2 Sn_{1z} - K_2 n_{1x,zz} + \mu_0 \chi_\alpha H_0^2 n_{1x} = 0, \\ \alpha_3 Sn_{1x} - K_1 n_{1z,zz} + \alpha_3 v_{1y,z} + (\mu_0 \chi_\alpha H_0^2 - \epsilon_\alpha \epsilon_0 E_0^2) n_{1z} = 0, \end{cases}$$
(5)

где $\eta_1 = (\alpha_3 + \alpha_4 + \alpha_6)/2, \ \eta_3 = \alpha_4/2, \ S = V_0/d.$

Граничные условия (2) и (3) примут вид:

$$\begin{cases} v_{1y}(z = \pm d/2) = 0, \\ \pm K_{22}n_{1x,z} + W_a n_{1x} = 0, \\ \pm K_{11}n_{1z,z} + W_p n_{1z} = 0, \end{cases}$$
(6)

где знак « \pm » соответствует поверхности $z = \pm d/2$. Мы выбрали вид для поверхностной энергии по аналогии с потенциалом Рапини [7]:

$$F_s = \frac{1}{2}W_a n_{1x}^2 + \frac{1}{2}W_p n_{1z}^2, \ W_a, \ W_p > 0,$$

где W_a, W_p — азимутальная и полярная компоненты силы поверхностного сцепления, соответственно.

Перейдем к безразмерным величинам: $\beta_a = K_{22}/(W_a d)$ и $\beta_p = K_{11}/(W_p d)$ — отношения характеристической длины поверхностного сцепления K_{ii}/W_j к толщине слоя d; $k = K_{11}/K_{22}$; $h = H_0^2/H_F^2$, $e = \operatorname{sgn}(\varepsilon_a)E_0^2/E_F^2$, где H_F и E_F — поля перехода Фредерикса [1, 4] для жесткого сцепления; $a^2 = V_0 \tau_d \beta/d$ — безразмерное напряжение сдвига, где $\tau_d = (-\alpha_2)d^2/K_{22}$ — характеристическое время релаксации директора; $\beta^2 = (K_{22}/K_{11}) \times \times (\alpha_3/\alpha_2)(\eta_3/\eta_1)$.

Уравнения (5) обладают симметрией относительно преобразования $z \to -z$. Обозначим как «четное» решение с четной симметрией компоненты n_{1x} . Тогда это решение имеет «четную» компоненту n_{1z} и «нечетную» компоненту v_{1y} . Вторым решение будет «нечетное» решение (с нечетной симметрией компоненты n_{1x}).

Решая систему (5) мы получили два типа симметрий решений. Подстановка этих решений в граничные условия (6) дает систему линейных однородных уравнений. Из условия существования нетривиального решения (определитель при коэффициентах системы равен нулю) получаем трансцендентное выражение, содержащее параметр $a^2 = a^2(e, h, \beta_a, \beta_p)$ — безразмерное напряжение сдвига, зависящее от величины внешних полей и компонент силы поверхностного сцепления. Решение трансцендентного уравнения относительно a^2 дает нам пороговое значение a_c^2 , при котором базовое состояние теряет устойчивость. Отметим, что из двух типов решений реализуется только то, которое соответствует наименьшему порогу a_c^2 .



Рис. 2. Зависимость порога a_c^2 от температуры T; e=0, h=0

4. Результаты

Расчеты порога неустойчивости a_c^2 (рис. 2–4) проводились численно для материальных параметров НЖК МББА [8, 9] в диапазоне температур существования нематической фазы ($T = 20 \div 44$ °C) в зависимости от температуры, электрического e или магнитного h полей. Графики для фиксированного полярного сцепления β_p показаны сверху, а для фиксированного азимутального сцепления — снизу. Фиксированные значения соответствовали жесткому сцеплению ($\beta_p = 0,001$ и $\beta_a = 0,001$, слева) и слабому сцеплению ($\beta_p = 1$ и $\beta_a = 1$, справа). Было получено, что для h < 8 и при любом значении e наименьший порог соответствовал решению для неустойчивости «четного» типа. С ростом компонент силы сцепления (уменьшением β_a и β_p) величина порога монотонно увеличивалась. Это объясняется тем, что при жестком сцеплении необходимо большее гидродинамическое воз-



Рис. 3. Зависимость порога a_c^2 от температуры T; e = -1, h = 0

действие для изменения равновесной ориентации (переход в новое структурно-ориентационное состояние). В отсутствие полей зависимость от β_a и β_p имеет симметричный характер (одинаковые значения на графиках слева и справа на рис. 2). Наличие электрического или магнитного полей нарушает эту симметрию. Для того, чтобы это объяснить запишем уравнения (5) в безразмерной форме, применив для компонент возмущений аффинное преобразование $N_{1x} = \beta n_{1x}, N_{1z} = n_{1z}, V_{1y} = (\beta^2 \eta_{13} \tau_d/d) v_{1y}$ и исключая градиент скорости $V_{1y,z}$ интегрированием первого уравнения (5) (в силу симметрии для «четного» типа неустойчивости константа интегрирования равна нулю):

$$(\partial_z^2 - h)N_{1x} + a^2 N_{1z} = 0, \quad (\partial_z^2 + e - k_{21}h)N_{1z} + a^2 N_{1x} = 0.$$
 (7)

Из системы (7) видно, что в отсутствии полей, при замене $N_{1x} \leftrightarrow N_{1z}$, система не меняется, а наличие полей нарушает сим-



Рис. 4. Зависимость порога a_c^2 от температуры T; e = 0, h = 1

метрию уравнений.

В рассматриваемой геометрии (рис. 1) электрическое и магнитное поля стабилизируют базовую ориентацию директора, в результате, наличие полей ведет к увеличению величины порога a_c^2 .

Для того, чтобы провести оценку влияния температуры (через температурные зависимости материальных параметров) на неустойчивость, было получено приближенное аналитическое выражение для порога неустойчивости с помощью проекционного метода Галеркина для одной (ведущей) моды:

$$n_{1x} = C_1 f(z), \quad n_{1z} = C_2 g(z),$$

где функци
иf(z) и g(z)удовлетворяют симметрии решения и граничным условиями.

Для «нечетного» решения:

$$f(z) = \zeta^o(z; \beta_a), \ g(z) = \zeta^e(z; \beta_p).$$

Для «четного» решения:

$$f(z) = \zeta^e(z; \beta_a), g(z) = \zeta^o(z; \beta_p),$$

где $\zeta^o(z;\beta) = \sin(2\pi z) + 2\pi\beta\sin(\pi z), \ \zeta^e(z;\beta) = \cos(\pi z) + \pi\beta.$

Подставляя одномодовые компоненты директора в уравнения (5), исключая компоненту скорости v_{1y} и проектируя полученные уравнения на соответствующие моды f(z) и g(z) для каждого типа симметрии решений, получаем систему из двух линейных однородных уравнений на коэффициенты C_i . Существование нетривиального решения дает нам выражение на порог однородной неустойчивости a_c^2 :

$$a_c^2 = \sqrt{\frac{[I(ff'') - \pi^2 hI(f^2)][I(gg'') - \frac{\pi^2}{k}(h - ke)I(g^2)]}{I(fg)[I(fg) - (1 - \eta_{13})I(f)I(g)]}},$$
 (8)

где интегралы определены как $I(u) = \int_{-d/2}^{d/2} u(z)dz$.

Для «нечетного» решения: I(f) = I(g) = 0, $I(f^2) = (3 + 32\beta_a + 12\pi^2\beta_a^2)/6$, $I(g^2) = (3 + 32\beta_p + 12\pi^2\beta_p^2)/6$, $I(fg) = [3 + 16(\beta_a + \beta_p) + 12\pi^2\beta_a\beta_p]/6$, $I(ff'') = -2\pi^2(3 + 20\beta_a + 3\pi^2\beta_a^2)/3$, $I(gg'') = -2\pi^2(3 + 20\beta_p + 3\pi^2\beta_p^2)/3$.

Для «четного» решения: $I(f) = (2 + \pi^2 \beta_a)/\pi$, $I(g) = (2 + \pi^2 \beta_p)/\pi$, $I(f^2) = (1 + 8\beta_a + 2\pi^2 \beta_a^2)/2$, $I(g^2) = (1 + 8\beta_p + 2\pi^2 \beta_p^2)/2$, $I(fg) = [1 + 4(\beta_a + \beta_p) + 2\pi^2 \beta_a \beta_p]/2$, $I(ff'') = -\pi^2 (1 + 4\beta_a)/2$, $I(gg'') = -\pi^2 (1 + 4\beta_p)/2$.

Выражение (8) предсказывает зависимость порога неустойчивости от температуры для неустойчивости «четного» типа через слагаемое $(1 - \eta_{13})I(f)I(g)$ за счет того, что коэффициенты вязкости Лесли α_i (составляющие коэффициент $\eta_{13} = \alpha_4/(\alpha_3 + \alpha_4 + \alpha_6)$) сильно зависят от температуры (суммарный вклад в a_c^2 порядка 10%). Так как для неустойчивости «нечетного» типа I(f) = I(g) = 0, то единственное слагаемое, содержащее коэффициенты вязкости, обращается в нуль, и одномодовое приближение дает решение, не зависящее от температуры. Поля входят только в числитель и увеличивают значение порога a_c^2 , так как e < 0 и h > 0. Отметим, что для НЖК с положительной анизотропией диэлектрической проницаемости $\varepsilon_a > 0$ электрическое поле e > 0 будет дестабилизировать базовую ориентацию директора.

5. Заключение

Проведен линейный анализ устойчивости стационарного сдвигового течения НЖК с начальной ориентацией директора перпендикулярно плоскости потока с учетом слабого поверхностного сцепления, внешних полей и температуры. Получены пороги неустойчивости для двух типом симметрий решения численно и приближенно аналитически. Анализ результатов расчета показал, что температура оказывает влияние на порог неустойчивости в пределах 10%, что позволяет определить отношение вязкостей η_{13} или компонент сил поверхностного сцепления из сравнения результатов эксперимента и численного моделирования.

Список литературы

- [1] де Жен П. Физика жидких кристаллов. М.: Мир, 1977. 400 с.
- [2] Manneville P., Dubois-Violette E. Shear flow instability in nematic liquid: theory of steady simple shear flows // J. Phys. (France). 1976. V. 37. P. 285–296.
- [3] Pieranski P., Guyon E. Instability of sertain shear flows in nematics // Phys. Rev. A. 1974. V. 9. P. 404–417.
- [4] Пикин С. А. Структурные превращения в жидких кристаллах. М.: Наука, 1981. 336 с.
- [5] Nasibullayev I. Sh., Tarasov O. S. Krekhov A. P. et al. Orientational instabiliries in nematic liquid crystals with weak anchoring under

combine action of steady flow and external fields // Phys. Rev. E. 2005. Vol. 72. P. 051706-1–10.

- [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.
- [8] 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. 2006. Vol. 33, № 1. P. 91–98.
- [9] Leenhouts F. Dekker A. J. Elastic constants of nematic liquid crystalline Schiff's bases // J. Chem. Phys. 1981. V. 4, № 3. P. 1956– 1965.