

УДК 539.378

МОДЕЛИРОВАНИЕ ДИНАМИКИ ЖИДКОГО КРИСТАЛЛА ПОД ДЕЙСТВИЕМ СЛАБЫХ ВОЗМУЩЕНИЙ

В. М. Садовский, О. В. Садовская, И. В. Смолехо

Институт вычислительного моделирования СО РАН, 660036 Красноярск, Россия

E-mails: sadov@icm.krasn.ru, o_sadov@icm.krasn.ru, ismol@icm.krasn.ru

Исследуются динамические процессы в жидких кристаллах с помощью упрощенной математической модели, в рамках которой жидкий кристалл рассматривается как мелкодисперсная сплошная среда с вращающимися частицами, обладающая упругим сопротивлением деформации объема и вязкоупругим сопротивлением повороту частиц. Изучается колебательный режим вращательного движения, описываемый уравнением Клейна — Гордона для касательного напряжения. Учитываются моментные взаимодействия частиц за счет неоднородности поля поворотов. Анализируются дисперсионные свойства, описываемые системой двух уравнений для касательного напряжения и угловой скорости. На основе этих уравнений численно исследуется поле углов поворотов в жидком кристалле под действием касательного напряжения, вызванного тепловым расширением металлической обкладки на границе области, занятой жидким кристаллом. Рассматривается задача о возмущении протяженного слоя жидкого кристалла 5СБ электрическим полем, которое создается зарядами на пластинах-обкладках конденсатора, расположенных периодически вдоль слоя. В явном виде выделяются особенности электрического потенциала на краях пластин. Приводятся результаты расчетов, воспроизводящие эффект Фредерикса в жидкокристаллическом слое.

Ключевые слова: жидкий кристалл, континуум Коссера, моментные взаимодействия, динамика, электрическое поле.

DOI: 10.15372/PMTF20210121

Введение. В жидкокристаллическом агрегатном состоянии могут находиться вещества, которые в определенном диапазоне температур способны проявлять одновременно свойства упругости и текучести. Для описания этих свойств в рамках математических моделей необходимо использовать как теорию течения жидкости, так и механику твердого тела. Трудность исследования жидких кристаллов обусловлена сложным строением и сильной зависимостью их свойств от внешних воздействий различного характера [1, 2]. Реакция жидких кристаллов на изменение температуры, механических напряжений и электромагнитного излучения различна. Поэтому они применяются в различных областях науки и техники, в том числе при создании устройств отображения, обработки и хранения информации, в медицинской и технической диагностике, в частности в термографии для отображения температурных полей. Большинство электрооптических устройств [3] основано на переориентации молекул жидкого кристалла (эффект Фредерикса [4]): под

Работа выполнена при финансовой поддержке Красноярского математического центра, финансируемого Министерством образования и науки РФ в рамках мероприятий по созданию и развитию региональных научно-образовательных математических центров (соглашение 075-02-2020-1631).

© Садовский В. М., Садовская О. В., Смолехо И. В., 2021

действием электрического поля в жидком кристалле возникает своего рода конкуренция между силами упругости, стремящимися сохранить первоначальное положение молекул, и электромагнитными силами, стремящимися ориентировать их вдоль электрического поля. Если силы внешнего электрического поля меньше сил упругости, то молекулы кристалла сохраняют ориентацию. В противном случае они поворачиваются, совершая колебательные движения, и в конечном счете ориентируются вдоль поля.

Статическое равновесное состояние жидких кристаллов описывается моделью Озена — Франка [5, 6], которая объясняет эффекты, вызванные электромагнитными полями. Согласно этой теории поле вызывает такую деформацию жидкого кристалла, при которой распределение молекул минимизирует свободную энергию, равную сумме упругой и диэлектрической составляющих. Для анализа динамики жидкого кристалла разработана модель нестационарного движения жидкого кристалла, основанная на законах сохранения и учитывающая наряду с поступательными вращательные степени свободы молекул [7, 8]. Такая модель универсальна, описывает различные движения жидкокристаллической среды, но содержит большое количество феноменологических параметров, подлежащих определению с помощью специальных физических экспериментов, и чрезвычайно сложна при численной реализации. Для детального изучения динамических процессов, происходящих в жидких кристаллах, целесообразно рассматривать упрощенные математические модели, описывающие частные случаи движения. Одним из таких подходов является представление жидкокристаллической среды в виде мелкодисперсной сплошной среды, в каждой точке которой молекулы могут совершать малые перемещения в соответствии с уравнениями акустики и поворачиваться на произвольный угол, испытывая при этом упругое или вязкоупругое сопротивление вращению. В основе такого подхода лежит теория континуума Коссера [9], в которой каждая материальная точка сплошной среды наделяется свойствами твердого тела малых размеров. В данной работе развивается этот подход при моделировании волновых движений жидкого кристалла, вызванных слабыми термомеханическими возмущениями и воздействием электрического поля.

1. Уравнения акустического приближения. Простейшая математическая модель жидкого кристалла [10] строится путем упрощения нелинейных уравнений редуцированного континуума Коссера, которые применяются при моделировании структурно-неоднородных материалов типа гранулированных сред с дополнительными степенями свободы вращательного движения частиц без учета моментных напряжений. Схема взаимодействия молекул (доменов молекул) жидкого кристалла, лежащая в основе рассматриваемой модели, приведена на рис. 1, *а*. В качестве термодинамических параметров состояния используются объемная деформация, обратимая составляющая угла относительного по-

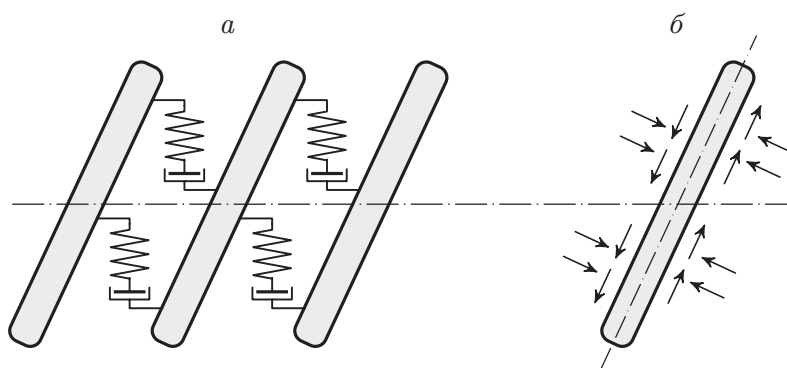


Рис. 1. Реологическая схема взаимодействия доменов, обусловленного их вращением (*а*), и схема действия касательных напряжений и давления (*б*)

ворота и энтропия или абсолютная температура. Учитываются малые перемещения центров масс доменов, вызванные неравномерным распределением внутренних напряжений, и произвольные по величине углы поворотов доменов вокруг центров масс под действием касательных напряжений, направление которых показано на рис. 1, б.

Углы поворотов доменов представляются в виде суперпозиции углов относительных и переносных поворотов. Углы переносных поворотов зависят от градиентов поля перемещений и описываются с помощью используемого в геометрически линейной теории косо-симметричного тензора малых вращений. Для описания углов относительных поворотов вводится ортогональный тензор общего вида. Угол относительного поворота разлагается на сумму упругой и вязкой составляющих.

Уравнения движения и определяющие уравнения жидкого кристалла выводятся из интегральных законов сохранения с помощью неравенства Клаузиуса — Дюгема, характеризующего термодинамически необратимый процесс вязкой диссипации энергии. В плоском случае система уравнений для скоростей и напряжений принимает следующий вид:

$$\begin{aligned} \rho \frac{\partial v_1}{\partial t} &= -\frac{\partial p}{\partial x_1} - \frac{\partial \tau}{\partial x_2} + f_1, & \rho \frac{\partial v_2}{\partial t} &= \frac{\partial \tau}{\partial x_1} - \frac{\partial p}{\partial x_2} + f_2, \\ J \frac{\partial \omega}{\partial t} &= 2\tau + g, & \frac{1}{\kappa} \frac{\partial p}{\partial t} &= -\frac{\partial v_1}{\partial x_1} - \frac{\partial v_2}{\partial x_2} + \beta \frac{\partial T}{\partial t}, \\ & & \frac{1}{\alpha} \frac{\partial \tau}{\partial t} &= \frac{\partial v_2}{\partial x_1} - \frac{\partial v_1}{\partial x_2} - 2\left(\omega + \frac{\tau}{\eta}\right). \end{aligned} \quad (1.1)$$

Здесь ρ — плотность среды; J — объемная плотность момента инерции; κ — модуль объемного сжатия; α — модуль упругого сопротивления вращению частиц; β — коэффициент теплового расширения; f_1, f_2, g — проекции вектора объемных сил и момента сил, зависящие, вообще говоря, от координат и времени.

Уравнение для температуры записывается в виде

$$\begin{aligned} \rho c \frac{\partial T}{\partial t} &= \frac{\partial}{\partial x_1} \left(\kappa_{11} \frac{\partial T}{\partial x_1} + \kappa_{12} \frac{\partial T}{\partial x_2} \right) + \frac{\partial}{\partial x_2} \left(\kappa_{21} \frac{\partial T}{\partial x_1} + \kappa_{22} \frac{\partial T}{\partial x_2} \right) + q, \\ \kappa_{11} &= \kappa_{\parallel} \cos^2 \theta + \kappa_{\perp} \sin^2 \theta, & \kappa_{22} &= \kappa_{\parallel} \sin^2 \theta + \kappa_{\perp} \cos^2 \theta, \\ \kappa_{12} &= \kappa_{21} = (\kappa_{\parallel} - \kappa_{\perp}) \sin \theta \cos \theta, & \frac{\partial \theta}{\partial t} &= \omega, \end{aligned} \quad (1.2)$$

где c — коэффициент теплоемкости; q — количество производимого тепла в единице объема; $\kappa_{\parallel}, \kappa_{\perp}$ — теплопроводность вдоль и поперек домена, ориентированного под углом θ к оси x_1 .

Для изотермических процессов линейная система уравнений (1.1) приводится к матричной форме относительно вектора $\mathbf{U} = (v_1, v_2, \omega, p, \tau)$:

$$A \frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} = B^1 \frac{\partial \mathbf{U}}{\partial x_1} + B^2 \frac{\partial \mathbf{U}}{\partial x_2} + Q\mathbf{U} + \mathbf{F}. \quad (1.3)$$

Система (1.3) является гиперболической по Фридрихсу [11], так как в ней матрицы-коэффициенты A, B^1, B^2 при производных по времени и пространственным переменным симметричны, и, кроме того, матрицы A и Q положительно определены. Это гарантирует корректность постановки задачи Коши с начальными данными $\mathbf{U}|_{t=0} = \mathbf{U}^0(x_1, x_2)$ и краевых задач с граничными условиями, вообще говоря, нелинейными, которые для разности двух решений удовлетворяют условию диссипативности

$$(v'_1 - v_1)((p' - p)n_1 + (\tau' - \tau)n_2) - (v'_2 - v_2)((\tau' - \tau)n_1 - (p' - p)n_2) \geq 0$$

(n_1, n_2 — проекции внешней нормали к границе).

С помощью простых преобразований из системы (1.1) можно получить неоднородное волновое уравнение для давления

$$\frac{\partial^2 p}{\partial t^2} = a_p^2 \Delta p + \kappa \beta \frac{\partial^2 T}{\partial t^2} - \frac{\kappa}{\rho} \left(\frac{\partial f_1}{\partial x_1} + \frac{\partial f_2}{\partial x_2} \right),$$

где $a_p = \sqrt{\kappa/\rho}$ — скорость звука; Δ — двумерный оператор Лапласа, и уравнение Клейна — Гордона для касательного напряжения

$$\frac{1}{\alpha} \frac{\partial^2 \tau}{\partial t^2} + \frac{2}{\eta} \frac{\partial \tau}{\partial t} = \frac{1}{\rho} \Delta \tau - \frac{4\tau}{J} + r, \quad r = \frac{1}{\rho} \left(\frac{\partial f_2}{\partial x_1} - \frac{\partial f_1}{\partial x_2} \right) - \frac{2g}{J}. \quad (1.4)$$

Отсюда, в частности, следует, что касательное напряжение тождественно равно нулю, если в области, занятой жидким кристаллом, отсутствуют массовые силы и моменты сил и если оно равно нулю на границе области и в начальный момент времени всюду в области. В этом случае молекулы жидкого кристалла не меняют ориентацию под действием механических или температурных возмущений на границе. Таким образом, из уравнения (1.4) следует, что эффект ориентационной термоупругости, который обсуждается в [12, 13] и других работах, в нематических жидких кристаллах не может наблюдаться.

Однородное уравнение Клейна — Гордона имеет экспоненциальные решения $\tau = \tau_0 e^{\lambda t}$, не зависящие от пространственных переменных. В этих решениях параметр λ принимает одно из двух значений:

$$\lambda_{1,2} = -\frac{\alpha}{\eta} \pm 2\pi i \nu_*, \quad \nu_* = \frac{\alpha}{2\pi\eta} \sqrt{\frac{4\eta^2}{\alpha J} - 1} \quad (i^2 = -1).$$

Значения λ могут быть как действительными, так и комплексно-сопряженными. В случае $\eta^2 \leq \alpha J/4$ оба решения описывают монотонно затухающее вращение доменов. При $\eta^2 > \alpha J/4$ реализуется осцилляционный режим вращения с круговой частотой ν_* и временем релаксации $t_* = \eta/\alpha$.

Частота ν_* , являющаяся частотой резонансного возбуждения жидкого кристалла, не зависит от размеров занимаемой области и граничных условий, представляя собой феноменологический параметр среды. Наличие такой частоты для жидкого кристалла 5CB в определенном диапазоне температур установлено экспериментально [14]. Монотонно затухающие решения без осцилляций реализуются при уменьшении коэффициента вязкости с ростом температуры в процессе перехода жидкого кристалла в состояние жидкости.

В одномерном случае уравнение Клейна — Гордона, соответствующее осцилляционному режиму, превращается в телеграфное уравнение, которое после замены искомой функции $u = \tau e^{t/t_*}$ и замены переменных принимает вид

$$\frac{\partial^2 u}{\partial \xi^+ \partial \xi^-} = -u, \quad \xi^\pm = \pi \nu_* \left(t \pm \frac{x}{a_\tau} \right), \quad a_\tau = \sqrt{\frac{\alpha}{\rho}}.$$

Общее решение этого уравнения определяется по формуле, обобщающей формулу Даламбера для волнового уравнения:

$$u(\xi^+, \xi^-) = \int_0^{\xi^+} J_0(-2\sqrt{(\xi^+ - \xi)\xi^-}) dh^+(\xi) + \int_0^{\xi^-} J_0(-2\sqrt{\xi^+(\xi^- - \xi)}) dh^-(\xi) + (h^+(0) + h^-(0)) J_0(-2\sqrt{\xi^+\xi^-}).$$

Здесь $J_0(z)$ — функция Бесселя первого рода нулевого порядка; $h^\pm(\xi)$ — две произвольные непрерывно дифференцируемые функции, с помощью которых определяется решение задачи Гурса:

$$u(\xi^+, 0) = h^+(\xi^+) + h^-(0), \quad u(0, \xi^-) = h^+(0) + h^-(\xi^-).$$

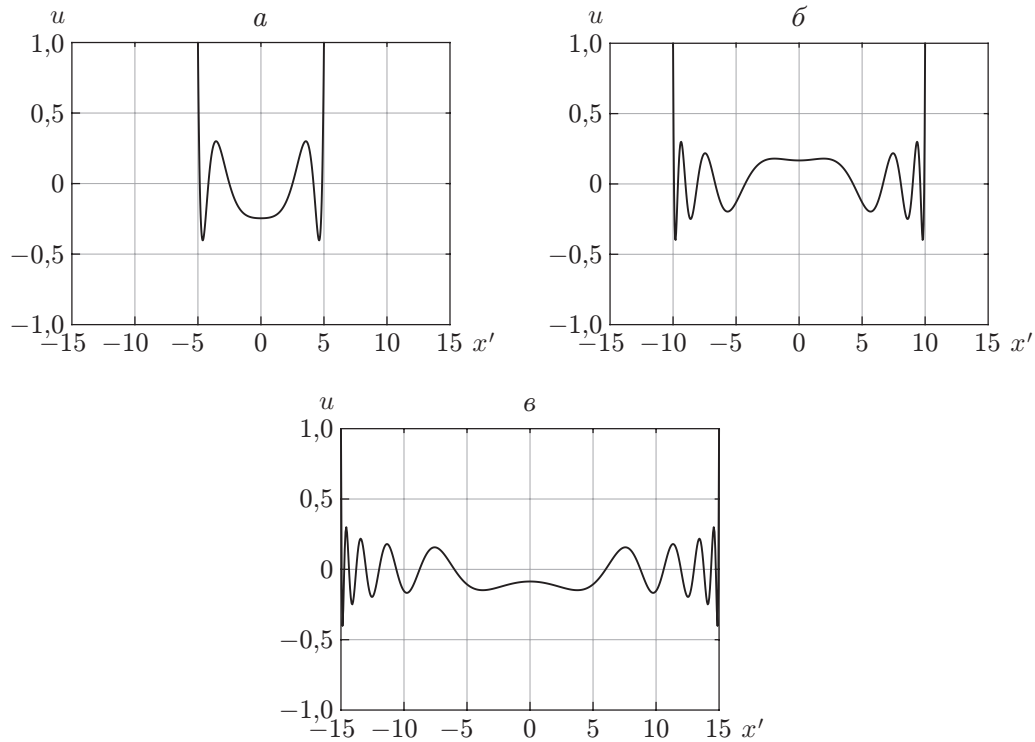


Рис. 2. Решение телеграфного уравнения для различных моментов безразмерного времени:
 а — $t' = 5$, б — $t' = 10$, в — $t' = 15$

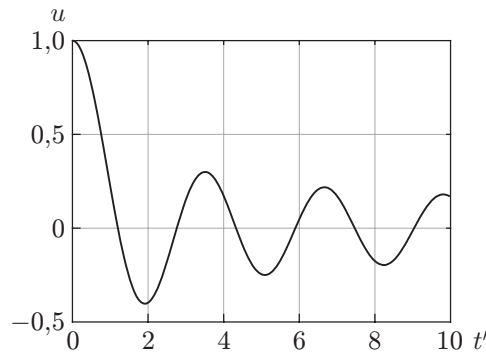


Рис. 3. Зависимость u в точке $x = 0$ от безразмерного времени

Пример такого решения с $h^\pm = 1/2$ приведен на рис. 2, 3. На рис. 2, на котором показано изменение функции u в области между фронтами двух расходящихся волн сдвига $x = \pm a_\tau t$ для безразмерного времени $t' = \pi \nu_* t$ и безразмерной координаты $x' = \pi \nu_* x / a_\tau$, видно, что по мере продвижения волн образуются осцилляции решения. Согласно графику зависимости решения в точке $x = 0$, находящейся между расходящимися фронтами, от времени (см. рис. 3) период осцилляций приблизительно равен π , что соответствует характерной частоте резонансного возбуждения среды ν_* .

2. Учет моментных взаимодействий. На рис. 4 представлена схема моментных взаимодействий в жидком кристалле, которая дополняет схему, приведенную на рис. 1. Вследствие неоднородности поля углов поворотов контактные напряжения распределяются

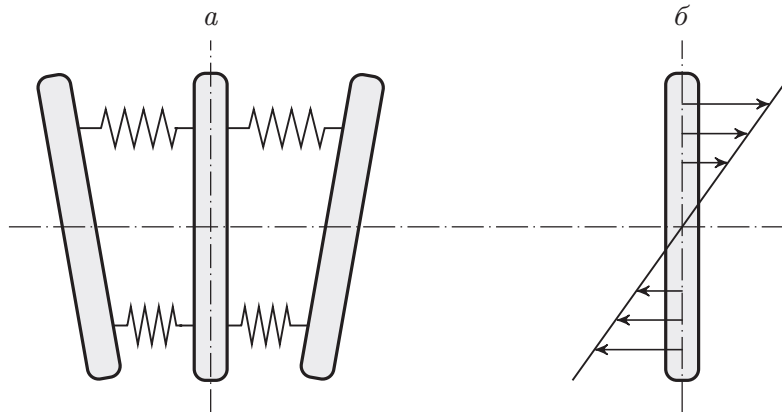


Рис. 4. Схема моментных взаимодействий доменов молекул (а) и эпюра нормального напряжения, вызванного изменением кривизны (б)

вдоль доменов по линейному закону, в результате чего появляются моментные напряжения, пропорциональные кривизне. Уточненная система уравнений получается, если к (1.1), (1.2) добавить уравнения

$$J \frac{\partial \omega}{\partial t} = \frac{\partial \mu_1}{\partial x_1} + \frac{\partial \mu_2}{\partial x_2} + 2\tau + g, \quad \frac{1}{\gamma} \frac{\partial \mu_1}{\partial t} = \frac{\partial \omega}{\partial x_1}, \quad \frac{1}{\gamma} \frac{\partial \mu_2}{\partial t} = \frac{\partial \omega}{\partial x_2}, \quad (2.1)$$

исключив входящее в (1.1) уравнение вращательного движения.

Полученная система уравнений для изотермических процессов также приводится к матричной форме (1.3) и является системой гиперболического типа, но граничные условия ставятся не только для скоростей, давления и касательного напряжения, но и для угловой скорости или моментных напряжений, а в левую часть условия диссипативности добавляется выражение $-(\omega' - \omega)((\mu'_1 - \mu_1)n_1 + (\mu'_2 - \mu_2)n_2)$.

Дифференцируя уравнения системы, в общем (неизотермическом) случае можно получить два уравнения второго порядка для касательного напряжения и угловой скорости:

$$\begin{aligned} \frac{1}{\alpha} \frac{\partial^2 \tau}{\partial t^2} + \frac{2}{\eta} \frac{\partial \tau}{\partial t} + 2 \frac{\partial \omega}{\partial t} &= \frac{1}{\rho} \left(\Delta \tau + \frac{\partial f_2}{\partial x_1} - \frac{\partial f_1}{\partial x_2} \right), \\ J \frac{\partial^2 \omega}{\partial t^2} - 2 \frac{\partial \tau}{\partial t} &= \gamma \Delta \omega + \frac{\partial g}{\partial t}. \end{aligned} \quad (2.2)$$

Так как в эти уравнения не входит температура, то из них также следует, что ориентационную термоупругость нематического жидкого кристалла невозможно наблюдать, если его начальное состояние является невозмущенным, касательное напряжение и угловая скорость на границе равны нулю и, кроме того, отсутствуют объемные силы и моменты сил.

В [15, 16] разработаны вычислительный алгоритм решения уравнений (2.2) на основе явной разностной схемы “крест” и компьютерная программа с использованием технологии CUDA для систем с графическими ускорителями. Проведена серия расчетов, основными целями которых являются верификация алгоритма и программы на точных решениях и определение диапазона значений параметров модели, в котором моментные напряжения оказывают существенное влияние на движение жидкого кристалла.

Были разработаны также алгоритм и программа, реализующие полную систему уравнений (1.1), (1.2), (2.1). Уравнения (1.1) аппроксимировались на прямоугольной сетке по схеме Годунова с применением уточняющей ENO-корректировки. Для решения уравнения теплопроводности использовалась неявная разностная схема типа схемы предиктор-корректор, построенная с помощью метода Иванова [17, 18]. Это позволило проводить

расчеты связанных термомеханических процессов на одной и той же сетке с одним и тем же шагом по времени, удовлетворяющим условию Куранта — Фридрихса — Леви для гиперболической подсистемы.

Во всех расчетах коэффициенты уравнений определялись для жидкого кристалла 5ЦБ при температуре $T_0 = 297$ К по данным экспериментов [19]. Коэффициент α вычислялся с использованием значения резонансной частоты $\nu_* = 350$ МГц, экспериментально полученного в [14]. Объемная плотность момента инерции определялась по формуле $J = \rho(N\delta_0)^2/12$ с использованием продольного размера молекул кристалла 5ЦБ $\delta_0 = 1,87$ нм с учетом числа молекул N в домене. Число N зависит от технологии изготовления жидкого кристалла и может варьироваться. В расчетах использовались данные для $N = 10, 25, 50$. При этом соотношение скоростей волн касательных напряжений $a_\tau = \sqrt{\kappa/\rho}$ и моментных напряжений $a_\mu = \sqrt{\gamma/J}$ меняется в диапазоне от $a_\tau < a_\mu$ до $a_\tau > a_\mu$. Коэффициент вязкости выбирался таким образом, чтобы время релаксации было равно $t_* = 1$ мкс. Принятые в расчетах феноменологические параметры рассматриваемой среды, включая диэлектрическую проницаемость в направлении ориентации доменов ε_{\parallel} и перпендикулярно этому направлению ε_{\perp} , имели следующие значения: $\rho = 1022$ кг/м³, $J = 0,03 \cdot 10^{-12}; 0,19 \cdot 10^{-12}; 0,75 \cdot 10^{-12}$ кг/м, $\kappa = 11,1$ ГПа, $\alpha = 0,036; 0,225; 0,900$ МПа, $\beta = 0,3 \cdot 10^{-6}$ К⁻¹, $\gamma = 6 \cdot 10^{-12}$ Н, $\eta = 0,036; 0,225; 0,900$ Па·с, $c = 100$ Дж/(кг·К), $\varkappa_{\parallel} = 0,226$ Вт/(м·К), $\varkappa_{\perp} = 0,135$ Вт/(м·К), $\varepsilon_{\parallel} = 16,7$, $\varepsilon_{\perp} = 7$.

На рис. 5 представлены результаты расчетов мгновенного нагружения слоя жидкого кристалла линейно распределенным вдоль участка верхней границы $x_1^0 - l_0/2 < x_1 < x_1^0 + l_0/2$ касательным напряжением $\tau = 2\tau_0(x_1 - x_1^0)/l_0$. Такое нагружение моделирует воздействие нагреваемой обкладки из металлического материала с коэффициентом теплового расширения, превышающим коэффициент теплового расширения среды, заключенной в этой обкладке. Остальная часть верхней границы свободна от напряжений. На нижней границе заданы условия гладкой жесткой стенки, на боковых границах — условия симметрии. В начальный момент времени кристалл находится в ненапряженном состоянии при постоянной температуре, а молекулы горизонтально ориентированы. На границах слоя ориентация молекул остается неизменной. Продольный и поперечный размеры расчетной

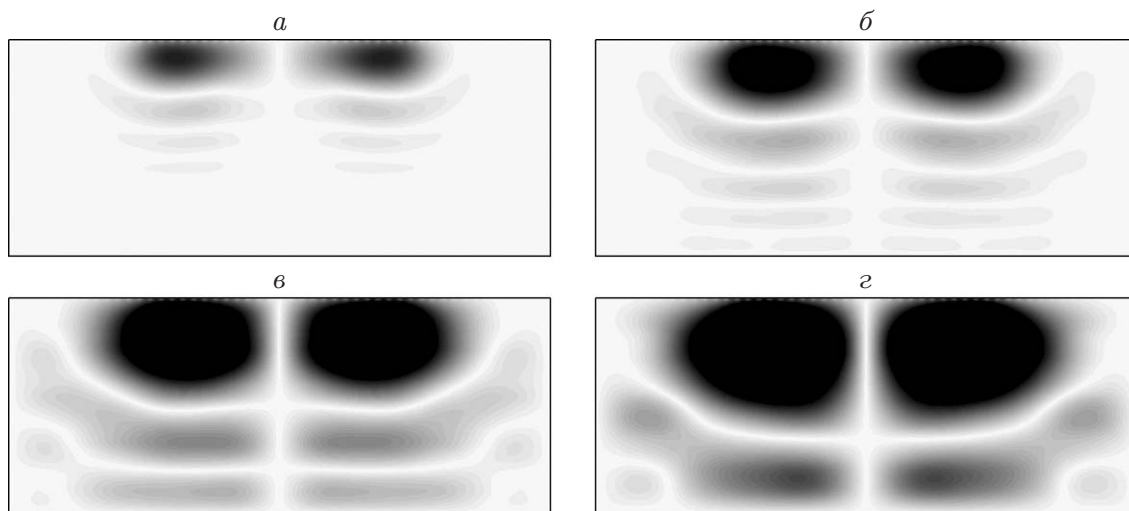


Рис. 5. Распределение угла ориентации (по модулю) доменов молекул в жидкокристаллическом слое:

a — $t = 0,4$ мс, $б$ — $t = 0,8$ мс, $в$ — $t = 1,45$ мс, $г$ — $t = 2$ мс

области $l_1 = 100$ мкм, $l_2 = 40$ мкм и протяженность зоны действия напряжения (ширина обкладки) $l_0 = 50$ мкм выбраны в соответствии со схемой эксперимента, на основе которого в работе [13] изучалась ориентационная термоупругость.

На рис. 5 различными оттенками показано распределение абсолютной величины угла поворота доменов в слое в диапазоне от $\theta = 0^\circ$ в начальном состоянии (белый цвет) до $\theta = \pm 30^\circ$ в конечном состоянии (черный цвет). Расчеты выполнены с параметрами $J = 0,03 \cdot 10^{-12}$ кг/м, $\alpha = 0,036$ МПа, $\eta = 0,036$ Па·с при значении амплитуды касательного напряжения $\tau_0 = 0,1$ Па. Согласно рис. 5 начиная с крайних точек зоны действия касательного напряжения со временем происходит изменение ориентации молекул, что должно приводить к появлению в эксперименте зон затемнения при просвечивании слоя. Однако этот эффект обусловлен не непосредственным воздействием теплового потока, а тепловым расширением обкладки.

Для верификации алгоритма использовалось точное решение системы (2.2) типа монохроматической волны: $\tau = \hat{\tau} e^{i(ft-kx_2)}$, $\omega = \hat{\omega} e^{i(ft-kx_2)}$ с частотой f и волновым числом k , удовлетворяющими системе дисперсионных уравнений

$$\left(-f^2 + \frac{2i\alpha f}{\eta} + \frac{\alpha k^2}{\rho}\right)\hat{\tau} + 2i\alpha f\hat{\omega} = 0, \quad -\frac{2if}{J}\hat{\tau} + \left(\frac{\gamma k^2}{J} - f^2\right)\hat{\omega} = 0.$$

Равенство нулю определителя системы приводит к биквадратному уравнению относительно волнового числа, корни которого равны $\pm k^\pm$:

$$k^\pm = \sqrt{\frac{\rho J f}{2\alpha \gamma} \left(d \pm \sqrt{d^2 - 4 \frac{\alpha \gamma}{\rho J} \left(f^2 - \frac{2i\alpha f}{\eta} - \frac{4\alpha}{J} \right)} \right)}, \quad d = \left(\frac{\alpha}{\rho} + \frac{\gamma}{J} \right) f - 2i \frac{\alpha \gamma}{\eta J}.$$

Анализ корней уравнения показывает, что рассматриваемая среда обладает дисперсией во всем частотном диапазоне. Характерным является наличие быстро затухающих монохроматических волн с фазовыми скоростями порядка десятков километров в секунду вблизи резонансной частоты 350 МГц, тогда как скорости волн на более низких по порядку частотах измеряются в метрах в секунду. При переходе через резонансную частоту скорость таких волн резко уменьшается и затухание становится менее существенным. Зависимости фазовой скорости $a = f/\text{Re } k^\pm$, степени затухания $\lambda = -1/\text{Im } k^\pm$ и групповой скорости $\hat{a} = df/\text{Re } dk^\pm$ от частоты для различных вариантов параметров приведены на рис. 6.

3. Воздействие электрического поля. Рассмотрим протяженный жидкокристаллический слой толщиной l_2 , находящийся под действием электрического поля, которое создается за счет появления зарядов на пластинах-обкладках конденсатора. Периодичность поля вдоль слоя обусловлена периодичностью расположения пластин на одном и том же расстоянии l_1 друг от друга как на верхней, так и на нижней поверхности жидкого кристалла (рис. 7).

Изменение зарядов во времени приводит к быстрому изменению электрического поля, описываемого зависимостью потенциала электрического поля φ от времени как от параметра.

Вне жидкокристаллического слоя ($x_2 < 0$ и $x_2 > l_2$) потенциал φ удовлетворяет уравнению Лапласа $\Delta\varphi = 0$. Внутри слоя выполняется уравнение, учитывающее анизотропию среды:

$$\nabla \cdot (\varepsilon \cdot \nabla \varphi) = 0,$$

где ∇ — двумерный оператор Гамильтона; ε — тензор диэлектрической проницаемости жидкого кристалла, зависящий от ориентации доменов:

$$\varepsilon = \begin{pmatrix} \varepsilon_{11} & \varepsilon_{12} \\ \varepsilon_{12} & \varepsilon_{22} \end{pmatrix},$$

$$\varepsilon_{11} = \varepsilon_{\parallel} \cos^2 \theta + \varepsilon_{\perp} \sin^2 \theta, \quad \varepsilon_{22} = \varepsilon_{\parallel} \sin^2 \theta + \varepsilon_{\perp} \cos^2 \theta, \quad \varepsilon_{12} = (\varepsilon_{\parallel} - \varepsilon_{\perp}) \cos \theta \sin \theta.$$

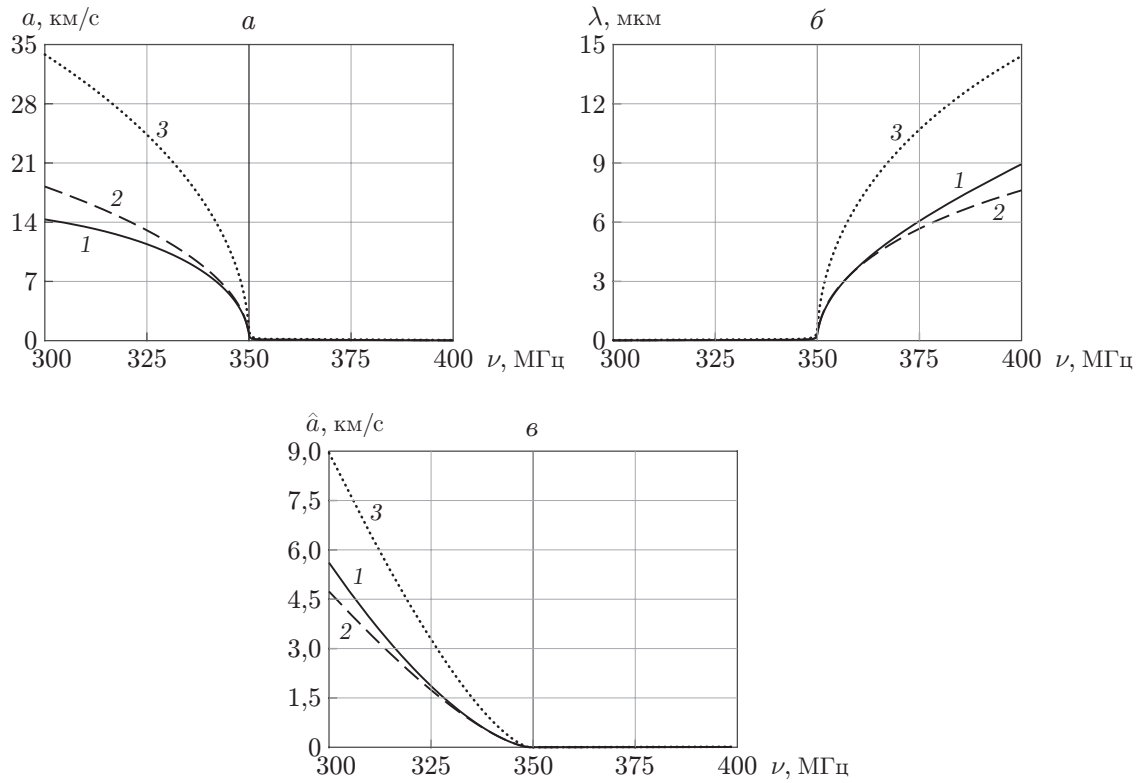


Рис. 6. Зависимости фазовой скорости (а), степени затухания волн (б) и групповой скорости (в) от частоты для различных вариантов расчетов:
 1 — $J = 0,03 \cdot 10^{-12}$ кг/м, $\alpha = 0,036$ МПа, $\eta = 0,036$ Па·с, 2 — $J = 0,19 \cdot 10^{-12}$ кг/м, $\alpha = 0,225$ МПа, $\eta = 0,225$ Па·с, 3 — $J = 0,75 \cdot 10^{-12}$ кг/м, $\alpha = 0,900$ МПа, $\eta = 0,900$ Па·с; тонкая сплошная линия — резонансная частота

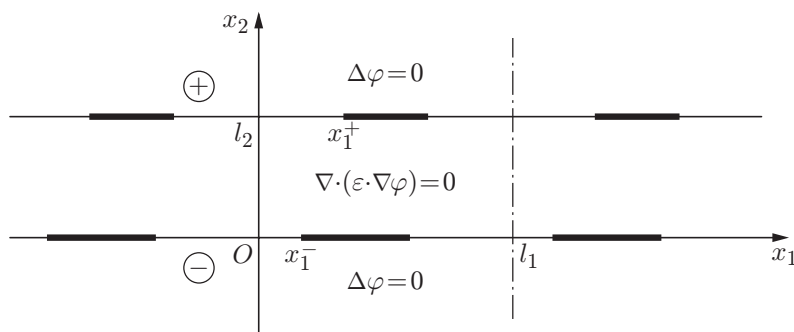


Рис. 7. Схема возмущения слоя электрическим полем

С учетом периодичности задачи в направлении x_1 при ее постановке можно рассматривать лишь часть слоя длиной l_1 . На пластинах-обкладках конденсатора электрический потенциал распределяется равномерно:

$$\begin{aligned}\varphi^+ = \varphi = \varphi_0 & \text{ при } x_2 = l_2, \quad x_1^+ \leq x_1 < x_1^+ + l_0^+, \\ \varphi = \varphi^- = -\varphi_0 & \text{ при } x_2 = 0, \quad x_1^- \leq x_1 < x_1^- + l_0^-. \end{aligned}$$

Здесь φ^\pm — предельные значения потенциала на границах жидкого кристалла извне слоя; φ — предельные значения на тех же границах изнутри слоя; x_1^\pm — координаты левых краев верхней и нижней пластин; l_0^\pm — длины пластин; φ_0 — постоянная, зависящая от интенсивности электрического поля.

На остальных участках границы, где жидкий кристалл граничит с воздухом (вакуумом), выполняются следующие условия:

$$\begin{aligned}\varphi^+ = \varphi, \quad \frac{\partial \varphi^+}{\partial x_2} = \varepsilon_{12} \frac{\partial \varphi}{\partial x_1} + \varepsilon_{22} \frac{\partial \varphi}{\partial x_2} & \text{ при } x_2 = l_2, \\ \varphi = \varphi^-, \quad \varepsilon_{12} \frac{\partial \varphi}{\partial x_1} + \varepsilon_{22} \frac{\partial \varphi}{\partial x_2} = \frac{\partial \varphi^-}{\partial x_2} & \text{ при } x_2 = 0. \end{aligned}$$

Эти условия следуют из условий непрерывности электрического потенциала на границах раздела сред и непрерывности нормальной составляющей вектора электрической индукции $\mathbf{D} = \varepsilon_0 \varepsilon \cdot \mathbf{E}$ ($\varepsilon_0 = 8,854\,187\,817\,220\,6 \cdot 10^{-12}$ Ф/м).

В результате воздействия электрического поля на домены жидкого кристалла действуют объемные силы $\mathbf{f} = (\mathbf{P} \cdot \nabla)\mathbf{E}$ и моменты сил $\mathbf{g} = \mathbf{P} \times \mathbf{E}$ ($\mathbf{E} = -\nabla\varphi$ — вектор электрического поля; $\mathbf{P} = \varepsilon_0 \chi \mathbf{E}$ — вектор электрической поляризации; $\chi = \varepsilon - I$ — тензор диэлектрической восприимчивости; I — единичный тензор). Учитывая плоскую симметрию задачи, эти формулы можно представить в виде

$$\begin{aligned}(f_1, f_2) = \varepsilon_0 \left(\chi_{11} \frac{\partial \varphi}{\partial x_1} + \chi_{12} \frac{\partial \varphi}{\partial x_2} \right) \left(\frac{\partial^2 \varphi}{\partial x_1^2}, \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x_1 \partial x_2} \right) + \\ + \varepsilon_0 \left(\chi_{12} \frac{\partial \varphi}{\partial x_1} + \chi_{22} \frac{\partial \varphi}{\partial x_2} \right) \left(\frac{\partial^2 \varphi}{\partial x_1 \partial x_2}, \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x_2^2} \right), \\ g = \varepsilon_0 (\chi_{11} - \chi_{22}) \frac{\partial \varphi}{\partial x_1} \frac{\partial \varphi}{\partial x_2} - \varepsilon_0 \chi_{12} \left(\left(\frac{\partial \varphi}{\partial x_1} \right)^2 - \left(\frac{\partial \varphi}{\partial x_2} \right)^2 \right). \end{aligned} \quad (3.1)$$

Силы и моменты, входящие в правые части уравнений, описывающих жидкий кристалл в акустическом приближении, инициируют поступательное и вращательное движение доменов. В свою очередь, изменение пространственной ориентации доменов вследствие действия сил и моментов приводит к изменению тензора диэлектрической проницаемости, в результате чего меняется электрическое поле.

Для численного решения задачи разработаны параллельный вычислительный алгоритм и компьютерная программа с использованием технологии CUDA [15, 20]. При решении уравнения Лапласа во внешности слоя применяется метод прямых. Решение внутри слоя строится методом конечных разностей на прямоугольной сетке, согласованной с сеткой, используемой в методе прямых. Реализуется итерационный процесс, в котором с помощью быстрого преобразования Фурье рекуррентно решается уравнение Пуассона относительно нового приближения потенциала φ^{n+1} :

$$\bar{\varepsilon} \Delta \varphi^{n+1} = \bar{\varepsilon} \Delta \varphi^n - \nabla \cdot (\varepsilon \cdot \nabla \varphi^n). \quad (3.2)$$

Правая часть (3.2) вычисляется по приближению φ^n , постоянная $\bar{\varepsilon}$ выбирается таким образом, чтобы итерации сходились. Процесс заканчивается в тот момент, когда относительная

погрешность вычислений $\|\varphi^{n+1} - \varphi^n\|/\|\varphi^n\|$ по равномерной разностной норме становится достаточно малой. Расчеты показали, что для сходимости итерационного процесса при $\bar{\varepsilon} = (\varepsilon_{\parallel} + \varepsilon_{\perp})/2$ с относительной погрешностью 10^{-5} требуется не более 10 итераций.

Для анализа особенностей в окрестности краев пластин-обкладок конденсатора, в которых изменяются граничные условия для электрического потенциала, построено точное сингулярное решение задачи с постоянным тензором ε для полубесконечной пластины $x_1 \geq 0$ и полуплоскости $x_2 \leq 0$, занятой диэлектриком [21]. Граничное значение потенциала на пластине считается равным нулю. На отрицательной полуоси — границе раздела диэлектрика и вакуума — выполняются условия непрерывности потенциала и нормальной составляющей вектора электрической индукции. В полярных координатах r, θ решение имеет вид $\varphi = r \sin \theta$ при $0 < \theta < \pi$ (в вакууме) и

$$\varphi = r \sqrt{\varepsilon_{11}(\varepsilon_{22} \cos^2 \theta - \varepsilon_{12} \sin 2\theta) + \varepsilon_{11}^2 \sin^2 \theta} (C_1 \cos \xi(\theta) + C_2 \sin \xi(\theta)) \quad (3.3)$$

при $\pi < \varphi < 2\pi$ (в области диэлектрика), где

$$\xi(\theta) = \operatorname{arctg} \frac{\varepsilon_{11} \operatorname{tg} \theta - \varepsilon_{12}}{\sqrt{\varepsilon_{11}\varepsilon_{22} - \varepsilon_{12}^2}},$$

$$C_1 = \frac{\varepsilon_{12}^2 \sin \xi(\pi)}{\sqrt{\varepsilon_{11}^3 \varepsilon_{22}} \sqrt{\varepsilon_{11}\varepsilon_{22} - \varepsilon_{12}^2}}, \quad C_2 = \frac{-\varepsilon_{12}^2 \cos \xi(\pi)}{\sqrt{\varepsilon_{11}^3 \varepsilon_{22}} \sqrt{\varepsilon_{11}\varepsilon_{22} - \varepsilon_{12}^2}}.$$

Первые производные потенциала по пространственным переменным x_1, x_2 являются разрывными, но ограниченными функциями. Вторые производные, входящие в формулы (3.1) для действующих сил, увеличиваются в окрестности краев пластин обратно пропорционально расстоянию до них.

Сингулярное решение (3.3) применялось для повышения точности решения краевой задачи, моделирующей поведение жидкого кристалла под действием электрического поля, в малой окрестности особой точки, в которой компоненты тензора диэлектрической проницаемости меняются незначительно. В остальной части слоя тензор ε нельзя считать постоянным. Для уточнения сил и моментов сил, обусловленных наличием электрического поля, реализован следующий алгоритм. Сначала краевая задача решалась методом сквозного счета без выделения особенностей. В зависимости от типа граничных условий использовалась полная система уравнений акустического приближения с учетом теплопроводности или система двух уравнений (2.2) для касательного напряжения и угловой скорости. Электрическое поле на каждом шаге по времени определялось по найденному распределению тензора диэлектрической проницаемости на основе итерационного процесса (3.2). После этого в окрестности каждой особой точки в области жидкого кристалла выделялся прямоугольник малого размера, на стороны которого попадает несколько сеточных узлов (для этого разностная сетка должна быть достаточно мелкой). Полученное в результате численного решения распределение электрического потенциала φ_h в прямоугольнике заменялось выражением $\bar{\varphi} = \varphi_0 + C\varphi$, где φ_0 — заданное граничное значение потенциала на обкладке конденсатора; C — неопределенная постоянная. Постоянная C находилась из условия сопряжения решений на границе прямоугольника. В соответствии с методом наименьших квадратов путем выбора C минимизировалось квадратичное отклонение

$$\delta^2 = \oint (\varphi_h - \varphi_0 - C\varphi)^2 ds.$$

Интегралы вычислялись на основе квадратурной формулы трапеций по граничным узлам прямоугольника. Из условия минимума получаем

$$C = \left(\oint \varphi^2 ds \right)^{-1} \oint (\varphi_h - \varphi_0) \varphi ds.$$

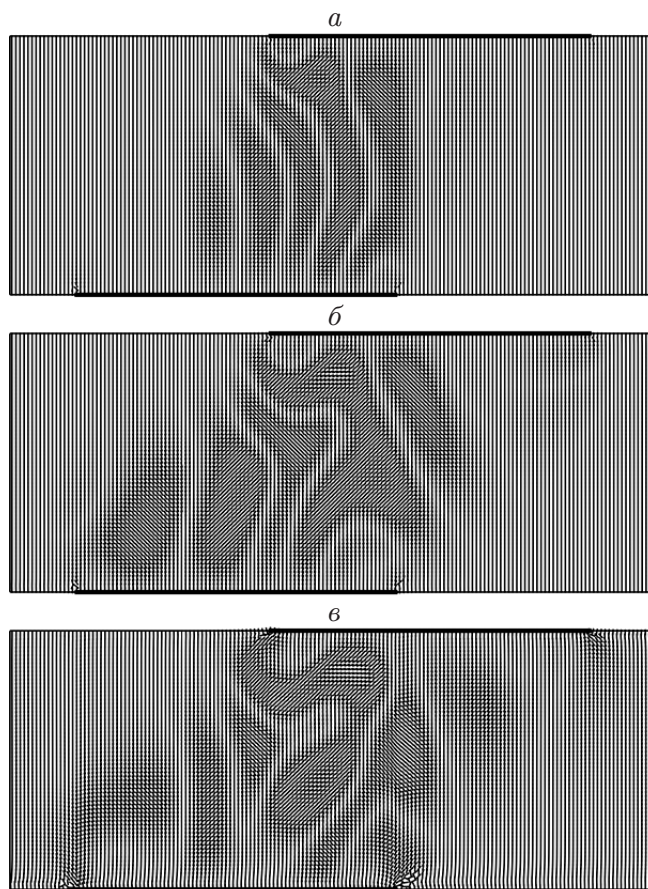


Рис. 8. Распределение углов поворота молекул жидкого кристалла в различные моменты времени:

$a - t = 1,8 \text{ мкс}$, $b - t = 3,6 \text{ мкс}$, $v - t = 18 \text{ мкс}$

На последнем шаге алгоритма значения сил и моментов сил со стороны электрического поля определялись по формулам (3.1) в выделенных прямоугольниках на вспомогательных мелких сетках. С помощью процедуры осреднения уточненные силы и моменты сил пересчитывались в ячейках более крупной разностной сетки, используемой для численного решения уравнений динамики поступательного и вращательного движения жидкого кристалла.

Описанный алгоритм, начиная с шага, на котором рассчитывался электрический потенциал, соответствующий текущему распределению тензора диэлектрической проницаемости, применялся на каждом шаге по времени. На рис. 8 представлено распределение углов поворотов молекул в слое жидкого кристалла под действием разности потенциалов $2\varphi_0 = 18 \text{ В}$, превышающей пороговое значение, при котором происходит потеря устойчивости статического равновесия молекул. На рис. 9 приведено поле электрического потенциала (в момент времени $t = 18 \text{ мкс}$) в жидкокристаллическом слое и вне его.

В расчетах использовались параметры среды $J = 3 \cdot 10^{-16} \text{ кг/м}$, $\alpha = 360 \text{ Па}$, $\eta = 3,6 \cdot 10^{-4} \text{ Па} \cdot \text{с}$, вычисленные по длине молекул жидкого кристалла 5ЦБ $\delta_0 = 1,87 \text{ нм}$. Разностная сетка содержит 160×64 узла. Удвоение числа узлов сетки по каждой координате не приводит к существенному различию результатов. В начальном состоянии молекулы имеют вертикальную ориентацию, со временем происходит переориентация в направлении электрического поля (см. рис. 8).

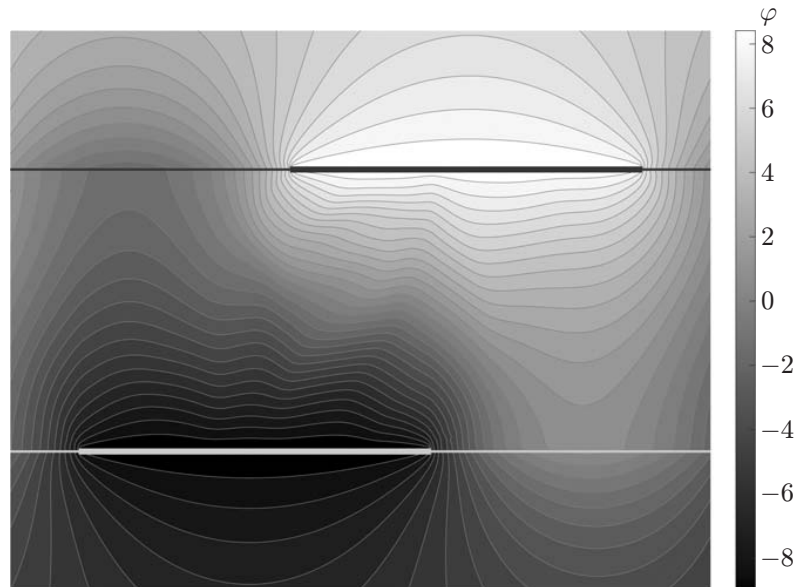


Рис. 9. Линии уровня электрического потенциала в жидкокристаллическом слое и вне его

Из рис. 8 следует, что приращения углов поворотов молекул жидкокристаллического слоя относительно начального положения могут достигать достаточно больших величин (более 45°). Дополнительные расчеты показали, что при разности потенциалов, значительно меньшей $2\varphi_0 = 18$ В, в области жидкого кристалла реализуется медленный колебательный режим движения с малыми углами поворотов. В целом результаты расчетов качественно согласуются с экспериментальными данными. Эффект Фредерикса переориентации молекул вдоль электрического поля наблюдается только с увеличением разности потенциалов при переходе через состояние равновесия, когда силы, обусловленные наличием электрического поля, превышают силы упругого взаимодействия.

Для проверки корректности вычислений найдено расчетное пороговое значение разности потенциалов в жидком кристалле с горизонтальной ориентацией волокон в случае непрерывных пластин конденсатора с $l_0^\pm = l_1$. Показано, что оно согласуется с пороговым значением, полученным по известной формуле для равномерного электрического поля

$$2\varphi_0 = \pi \sqrt{\frac{\gamma}{\varepsilon_0(\varepsilon_{\parallel} - \varepsilon_{\perp})}}.$$

Из рис. 8 следует также, что при наличии неравномерного электрического поля образуются домены одинаково ориентированных молекул, количество которых динамически меняется со временем и которые содержат достаточно большое число частиц (согласно экспериментальным данным [22] — $10^4 \div 10^5$ молекул).

Таким образом, предлагаемая математическая модель качественно описывает некоторые особенности поведения жидкокристаллических материалов и может применяться при исследовании динамических процессов, происходящих в жидких кристаллах под действием слабых механических, температурных и электрических возмущений.

ЛИТЕРАТУРА

1. Де Жен П. Физика жидких кристаллов. М.: Мир, 1977.
2. Де Же В. Г. Физические свойства жидкокристаллических веществ. М.: Мир, 1982.
3. Блинов Л. М. Электро- и магнитооптика жидких кристаллов. М.: Наука, 1978.

4. **Фредерикс В., Цветков В.** Об ориентирующем воздействии электрического поля на молекулы анизотропных жидкостей // Докл. АН СССР. 1935. Т. 2, № 7. С. 528–534.
5. **Oseen C. W.** The theory of liquid crystals // Trans. Faraday Soc. 1933. V. 29. P. 883–899.
6. **Frank F. C.** On the theory of liquid crystals // Disc. Faraday Soc. 1958. V. 25, iss. 1. P. 19–28.
7. **Ericksen J. L.** Conservation laws for liquid crystals // Trans. Soc. Rheol. 1961. V. 5, iss. 1. P. 23–34.
8. **Leslie F. M.** Some constitutive equations for liquid crystals // Arch. Ration. Mech. Anal. 1968. V. 28. P. 265–283.
9. **Cosserat E., Cosserat F.** Théorie des Corps Déformables // Chwolson's Traité Physique. P.: Librairie Sci. A. Hermann et Fils, 1909. P. 953–1173.
10. **Садовский В. М., Садовская О. В.** Об акустическом приближении термомеханической модели жидкого кристалла // Физ. мезомеханика. 2013. Т. 16, № 3. С. 55–62.
11. **Годунов С. К.** Уравнения математической физики. М.: Наука, 1979.
12. **Чандрасекар С.** Жидкие кристаллы. М.: Мир, 1980.
13. **Деменев Е. И., Поздняков Г. А., Трашкеев С. И.** Нелинейное ориентационное взаимодействие нематического жидкого кристалла с тепловым потоком // Письма в ЖТФ. 2009. Т. 35, вып. 14. С. 76–83.
14. **Беляев Б. А., Дрокин Н. А., Шабанов В. Ф., Шепов В. Н.** Диэлектрическая анизотропия жидкого кристалла 5CB в дециметровом диапазоне длин волн // Физика твердого тела. 2000. Т. 42, вып. 3. С. 564–566.
15. **Sadovskii V., Sadovskaya O.** Acoustic approximation of the governing equations of liquid crystals under weak thermomechanical and electrostatic perturbations // Advances in mechanics of microstructured media and structures. Cham: Springer, 2018. P. 297–341. (Ser. Advanced structured materials; V. 87, chap. 17).
16. **Смолехо И. В., Садовская О. В., Садовский В. М.** Численное моделирование акустических волн в жидком кристалле с использованием технологии CUDA // Вычисл. технологии. 2017. Т. 22, спецвып. 1. С. 87–98.
17. **Иванов Г. В., Кургузов В. Д.** Схемы решения одномерных задач динамики неоднородных упругих тел на основе аппроксимации линейными полиномами // Динамика сплошной среды / АН СССР. Сиб. отд-ние. Ин-т гидродинамики. 1981. Вып. 49. С. 27–44.
18. **Иванов Г. В.** Численное решение динамических задач упругопластического деформирования твердых тел / Г. В. Иванов, Ю. М. Волчков, И. О. Богульский, С. А. Анисимов, В. Д. Кургузов. Новосибирск: Сиб. унив. изд-во, 2002.
19. **Skarp K., Lagerwall S. T., Stebler B.** Measurement of hydrodynamic parameters for nematic 5CB // Mol. Cryst. Liquid. Cryst. 1980. V. 60, iss. 3. P. 215–236.
20. **Sadovskii V. M., Sadovskaya O. V., Smolekho I. V.** Numerical modeling of the dynamic processes in liquid crystals under the action of thermomechanical and electrostatic perturbations // AIP Conf. Proc. 2019. V. 2164. P. 090006-1–090006-8.
21. **Smolekho I. V., Sadovskii V. M., Sadovskaya O. V., Kireev I. V.** Accounting for singularities of the electric field acting on a liquid crystal // AIP Conf. Proc. 2020. V. 2302. P. 090004-1–090004-6.
22. **Shibaev V. P., Freidzon Ya. S., Kostromin S. G.** Molecular architecture and structure of thermotropic liquid crystal polymers with mesogenic side groups // Liquid crystalline and mesomorphic polymers. N. Y.: Springer, 1994. P. 77–120.

*Поступила в редакцию 25/IX 2020 г.,
после доработки — 25/IX 2020 г.
Принята к публикации 26/X 2020 г.*