Известия НАН Армении, Физика, т.60, №1, с.62–70 (2025) УДК 532.783 DOI: 10.54503/0002-3035-2025-60.1-62

СВЕТО-ИНДУЦИРОВАННАЯ СКАЧКООБРАЗНАЯ ГИДРОДИНАМИЧЕСКАЯ ИНВЕРСИЯ НАПРАВЛЕНИЯ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ОРИЕНТАЦИИ В ЖИДКИХ КРИСТАЛЛАХ

В.С. АКОБЯН¹, Т.В. ГАЛСТЯН², Р.С. АКОПЯН^{1*}

¹Ереванский государственный университет, Ереван, Армения ²Laval University, Quebec, Canada

*e-mail: rhakob@ysu.am

(Поступила в редакцию 25 декабря 2024 г.)

Численно решена задача о лазерно-индуцированной гидродинамической переориентации (ЛИГП) директора гибридно-ориентированного нематического жидкого кристалла (НЖК) с прозвольными граничными условиями. ЛИГП изучена при различных мощностях лазера и для двух противоположных направлений градиента температуры. Градиент скорости гидродинамического потока приводит к небольшому увеличению кривизны гибридной ориентации, когда свет создает градиент температуры вовне кривизны. Кривизна меняет знак, когда свет создает градиент температуры снаружи вовнутрь кривизны гибридной ориентации. Исследована также зависимость переориентации от энергии крепления молекул к границам.

1. Введение

Лазерно-индуцированные гидродинамические переориентации (ЛИГП) в жидких кристаллах (ЖК) изучались во многих работах [1-5]. Были изучены три механизма лазерно-индуцированных гидродинамических движений: гравитационный механизм Рэлея-Бенара, термокапиллярный механизм Марангони и механизм прямого объемного расширения. Все эти предсказания получили экспериментальное подтверждение [5]. Недавно лазерно-индуцированные процессы захвата, транспортировки и устойчивых периодических движений микрочастиц демонстрировались с помощью жидкокристаллических пленок [6]. В жидкокристаллических пленках со свободной поверхностью, подвергающихся нагреву световым лучом, возникают разнообразные движения микрочастиц в результате конвекции Марангони в сочетании с упругими деформациями. В работе [7] продемонстрирована оптически индуцированная тепловая нелинейность в толстой нематической жидкокристаллической ячейке, возникающая за счет частичного поглощения света покрытием ITO (indium-tin-oxide) в инфракрасном диапазоне спектра. Этот процесс может быть использован для множества приложений, в числе которых пространственное формирование и определение характеристик фемтосекундных импульсов [8]. Различные сценарии формирования гидродинамических потоков в микроразмерных гибридных выравненных нематических каналах численно рассмотрены в работе [9]. Отмечается, что характеристика гидродинамического потока зависит не только от градиента температуры, но и от энергий закрепления [10, 11]. В работе [12] используются ферроэлектрические микропластинки и прикладывается электрическое поле. В этом случае пластинки используются в качестве проводника для молекул ЖК. Переориентация ЖК используется для анализа электрического поля, создаваемого при облучении светом в кристаллах ниобата лития, легированных железом. Характеристика электрического поля, оптически генерируемого внутри ЖКслоя, крайне желательна в связи с реализацией новых оптических устройств, которые будут интегрированы в оптофлюидические платформы [13].

Гидродинамические потоки в ЖК могут быть идуцированы также электрическими полями. Их можно использовать [14] для управления движением коллоидных частиц. Замена изотропной жидкой среды на ЖК приводит к резким изменениям в статическом и динамическом поведении коллоидных частиц. Особый интерес представляют ситуации, когда коллоиды перемещаются через ЖКсреду, движимые внешним электрическим полем. Приложение электрического поля к микросферам, взвешенным в жидком кристалле, вызывает перемещение частиц в плоскости, перпендикулярной направлению приложенного поля [15]. В зависимости от амплитуды и частоты приложенного электрического поля выше порогового значения может наблюдаться множество различных режимов движения, которые могут приводить к линейным, круговым или случайным траекториям частиц. Оказывается, гидродинамические движения молекул ЖК могут быть индуцированы электрическим полем даже достаточно далеко от пределов воздействия электрического поля [16]. Локальные импульсы электрического потенциала могут генерировать значительные дальнодействующие морфологические изменения в самоориентированных молекулярных пленках. Это позволяет предположить, что должны происходить соответствующие возмущения в клеточной мембране. Авторы [16] полагают, что эти гидродинамические движения индуцируются градиентом давления, вызванным увеличением ориентационного порядка молекул в электрическом поле и уменьшением занимаемого ими объема (механизм объемного расширения). Эти морфологические изменения могут влиять на динамику распространения потенциала действия, влияя на ионный гейтинг и изменяя скорость диффузии и транспорта ионов вдоль и поперек мембраны.

В нашей недавней работе [17] было сообщено об экспериментальном исследовании динамики оптических свойств гибридно-ориентированного нематического жидкого кристалла (НЖК) под действием потока, вызванного механизмом объемного расширения. Целью настоящей работы являлось подробное теоретическое численное изучение полученных экспериментальных результатов, а также предсказание новых проявлений данного механизма.

2. Основное уравнение переориентации

Рассмотрим горизонтально расположенную плоскую капиллярную ячейку с НЖК (рис. 1а). На нижней подложке молекулы ЖК ориентированы перпендикулярно к стенке, а на верхной – параллельно. Нормаль к стенкам ячейки направим вдоль оси *z*, а ось *x* – в плоскости ячейки.

Начало координат будет располагаться на левом нижнем краю ячейки. При



Рис.1. (а) Схематическое изображение механизма прямого объемного расширения, (b) и (d) представление ЖК в виде «гибкой ленты», (c) изменение знака гибридности НЖК по сравнению с ориентацией (a).

необходимости к двум концам ячейки могут быть прикреплены дополнительные объемы: слева– для усиленного поглощения света добавлением небольшого количества красителя, а справа – для отлива избыточного ЖК. Падающий свет с левого края ячейки сильно поглощается. Поглощенная световая энергия нагревает НЖК, вызывая его тепловое расширение. Градиент давления, направленный по оси x, приводит к пуазейлевскому течению НЖК. Скорость гидродинамического потока в ячейке $\mathbf{v} = v \mathbf{e}_x$, а также задачу в целом, считаем однородными в плоскости ячейки (x, y): $\partial/\partial x = \partial/\partial y = 0$. На подложках имеем прилипание молекул, и градиент скорости переориентирует молекулы благодаря сильной связи гидродинамических и ориентационных движений в НЖК [18]. В описанной схеме и в приближении слабых возмущений можно полагать, что единичный вектор в направления преимущественной ориентации молекул – директор **n** (причем, направления **n** и –**n** эквивалентны [18]) в процессе потока не выходит из плоскости (x, z) начальной ориентации.

Поведение рассматриваемой системы в общем случае описывается набором трех нелинейных динамических уравнений: для переориентации директора НЖК, гидродинамического движения (уравнение Навье–Стокса) и теплопроводности. Процесс начинается с изменения температуры за счет поглощения. В работе [19] с помощью решения линеаризованных и стационарных уравнений теплопроводности и Навье–Стокса получено уравнение угла переориентации $\phi(z, t)$ директора НЖК:

$$\frac{\partial \varphi}{\partial \tau} = (K + \Delta \sin^2 \varphi) \frac{\partial^2 \varphi}{\partial \zeta^2} + \frac{1}{2} \Delta \sin(2\varphi) \left(\frac{\partial \varphi}{\partial \zeta}\right)^2 + DP(2\zeta - 1)(\alpha \sin^2 \varphi - 1), \quad (1)$$

где $\tau = K_1 t/(\gamma L^2)$ – безразмерное время, $\zeta = z/L$ – безразмерная координата в направлении скорости потока, $K = K_3/K_1$, $\Delta = (K_1 - K_3)/K_1$, $D = 6\beta\chi V\alpha_2/(K_1 \rho c_p l)$, $\gamma = \alpha_3 - \alpha_2$, K_i – упругие константы Франка, α_i – коэффициент Лесли НЖК, ρc_p – удельная объемная теплоемкость (в эрг/см³К), χ – коэффициент поглощения (в см⁻¹), P – интенсивность лазерного излучения (в эрг/см² сек), V – объем поглощающей жидкости, а β – коэффициент теплового расширения (в K⁻¹), L – толщина ячейки по координате *z*, l – ширина ячейки по координате *y*.

Заметим, что уравнение (1) в одноконстантном приближении для упругих постоянных ($K_1 = K_3$) имеет вид известного уравнения «управляемого затуханием синус–Гордона». Оно описывает лазерно-индуцированное (без порога) гидродинамическое течение в НЖК с директором, ограниченным в плоскости (x, z). Мы собираемся решить это уравнение с помощью программы «Mathematica 11». Тем не менее, чтобы решить уравнение, нам необходимо определить начальные и граничные условия, связанные с энергиями закрепления.

3. Граничные условия

Теперь нам нужно зафиксировать ориентацию нематического директора на соответствующих поверхностях в определенных направлениях и с определенными энергиями закрепления. Это достигается различными способами, обычно путем осаждения ориентирующего слоя, расположенного между ЖК материалом и твердой подложкой, который воздействует на молекулы ЖК, наклоняя нематический директор (т.е. механическим трением) в определенном направлении по отношению к нормали к поверхности. Знание ориентации нематического директора на интерфейсе и энергии его закрепления очень важно для оптимальной конструкции ЖК ячейки, которая, в свою очередь, определяет производительность устройства. Для граничных условий угла переориентации часто делается приближение сильного закрепления; это означает, что ориентация директора на границе фиксирована и не зависит от внешних возбуждений. Здесь мы обсуждаем более общий случай, поэтому мы не рассматриваем бесконечную энергию закрепления, и в свободную энергию должен быть включен поверхностный вклад. Предлагаем способ оценки энергии закрепления ЖК путем определения угла наклона ЖК на границе с подложкой. Для этой задачи в приближении Рапини [20] граничные условия имеют следующий вид:

$$(K + \Delta \sin^2 \varphi) \frac{\partial \varphi}{\partial \zeta} - \Sigma \sin(2\varphi) = 0.$$
 (2)

Здесь $\Sigma = \sigma L/(2K_1) - 6$ езразмерная энергия закрепления, σ – коэффициент поверхностной энергии закрепления (в эрг/см²). Поскольку мы изучаем влияние энергий закрепления на переориентацию, они должны быть представлены на граничных условиях. Другими словами мы определяем граничные условия, которые зависят от энергий закрепления. Значения последних обычно находятся в диапазоне 10^{-4} – 10^{-1} эрг/см² (в нашем случае $\Sigma = 10^{-1}$ –10) [21]. Если энергия закрепления составляет 10^{-1} эрг/см² ($\Sigma = 10$), то граничное условие является сильным, что означает отсутствие изменения ориентации на границе. Для гибридноориентированных НЖК начальное условие имеет следующий вид:

$$\varphi(\zeta, 0) = \frac{\pi}{2}\zeta. \tag{3}$$

Это означает, что на нижней стенке мы имеем гомеотропную ориентацию, а на верхней стенке молекулы ориентированы в плоскости.

Благодаря своей эластичности НЖК можно рассматривать как «гибкую ленту». Это означает, что под действием внешних сил (в частности, гидродинамических) НЖК как целое может менять свою гибридную ориентацию (кривизну гибридности). В наших расчетах мы изучили две конфигурации падения света: на левый край (*x* = 0) ячейки и на противоположный край.

4. Численные решения и обсуждение

Уравнение (1) решалось для двух направлений светового падения и гидродинамического потока с граничными и начальным условиями (2) и (3) с помощью программы «Mathematica 11». В расчетах для НЖК МВВА [22] принималось: $K_1 = 6.2 \times 10^{-7}$ и $K_3 = 8.2 \times 10^{-7}$ эрг/см, $\alpha_2 = 0.8$ и $\alpha_3 = 0.012$ П, $\beta = 10^{-3} K^{-1}$, $\rho c_p = 1 \text{ Дж/см}^3 K$, $V = 1 \text{ см}^3$, L = 12 мкм и l = 0.1 см. НЖК МВВА и геометрические размеры ячейки выбраны нами в качестве примера. Мы исследуем динамику переориентации директора и его зависимость от мощности лазерного излучения.

Основные полученные результаты могут быть обобщены следующим образом: когда энергия поверхностного закрепления у нижней стенки (изначально гомеотропно- ориентированной) составляет меньше 10⁻³ эрг/см² (слабое граничное условие), а энергия верхней стенки (изначально планарно-ориентированной) составляет больше 10^{-1} эрг/см² (сильное граничное условие) и свет падает на левый край ячейки (x < 0, рис.1a), т.е. снаружи вовнутрь кривизны «гибкой ленты», то гидродинамический поток, пытаясь заставить молекулы принять направление потока, приближает ячейку к однородно-планарной ориентации. На рис.2а представлено, как изменяется переориентация, вызванная различной мощностью лазера, через 0.9 секунды после начала гидродинамического потока. 0.9 секунды – это время, после которого переориентация насыщается в случае мощности лазера 0.5 мВт/см². Надо отметить, что гидродинамическое движение и переориентация директора возникают без порога интенсивности света и уменьшаются с увеличением толщины ячейки. Мы видим, что слабое лазерное излучение (0.05 мВт/см²) почти не изменяет ориентации, и мощности лазера 0.5 мВт/см² достаточно для переориентации молекул в сторону потока, но гораздо меньше, чем это необходимо для фазового перехода НЖК.

Гомеотропно-ориентированные молекулы отрываются от нижней подложки и направляются в сторону потока, т.е. стремятся к планарной ориентации. Важно заметить, что, если необходимо, то со стороны падения света можно прикрепить большой объем с ЖК (не показанный на рис.1), сообщающийся с ячейкой. Тем самым поглощение света можно сделать более эффективным. Если мощность превышает 0.5 мВт/см², то переориентация происходит быстрее и угол переориентации становится больше. Это легко увидеть на рис.2b, где показано распределение угла переориентации по толщине ячейки и во времени под действием лазерного излучения мощностью 1 мВт/см². Кроме того, поскольку поверхностная энергия закрепления нижней стенки меньше, угол переориентации молекул вблизи нижней стенки больше.

Когда энергия поверхностного закрепления нижней стенки составляет 10^{-1} , а энергия верхней стенки – 10^{-3} эрг/см², и опять свет падает на левый край ячейки (рис.1а), т.е. градиент температуры направлен в сторону снаружи вовнутрь кривизны «гибкой ленты», то гидродинамический поток стремится повернуть гибридность и «гибкая лента» меняет знак кривизны (рис.3). Таким образом, происходит скачкообразное изменение направления изогнутости гибридности из состояния рис.1а в состояние рис.1с, или из «гибкой ленты» (b) в «гибкую ленту» (d). Это происходит в тот момент, когда энергия деформации становится больше



Рис.2. Угол переориентации при наложении слабого граничного условия на нижнюю и сильного граничного условия на верхнюю стенки. Свет падает на левый край ячейки. (а) Угол между директором и осью *z* для различных *z* и мощностей лазера: кривая *l* соответствует начальному состоянию (t = 0 с). Остальные кривые соответствуют переориентации, вызванной через 0.9 с после запуска лазерного излучения. Кривая 2 - P = 0.05, кривая 3 - P = 0.5 и кривая 4 - P = 1 мВт/см². (b) Распределение угла переориентации по толщине ячейки и изменение во времени при фиксированной мощности 1 мВт/см².



Рис.3. Угол переориентации при наложении сильного граничного условия на нижнюю и слабого граничного условия на верхнюю стенки. Свет падает на левый край ячейки. (а) Угол между директором и осью *z* для различных *z* и мощностей лазера: кривая *l* соответствует начальному состоянию (t = 0 с). Остальные кривые соответствуют переориентации, вызванной запуском лазерного излучения через 1 с. Кривая 2 - P = 0.05, кривая 3 - P = 0.5 и кривая 4 - P = 4 мВт/см². (b) Распределение угла переориентации по толщине ячейки и изменение во времени при фиксированной мощности 4 мВт/см².

энергии закрепления верхней поверхности. После скачкообразного обращения кривизны «гибкой ленты» гидродинамический поток направляется уже изнутри наружу, и мы имеем дополнительное увеличение кривизны.

В этом случае при малых мощностях лазера (0.05 мВт/см²), постепенно происходит слабая переориентация, зависимость переориентации от z/L близка к линейной, и реверсирования кривизны не происходит. При более высоких мощностях лазера (4 мВт/см²) происходит резкое изменение кривизны «гибкой ленты». На рис.3b показано распределение угла переориентации по толщине ячейки и во времени под действием лазерного излучения 4 мВт/см². В случае обратной ситуации (зона экспозиции света находится справа, рис.1а) для градиента температуры, когда скорость потока направлена наружу от кривизны «гибкой ленты», кривизна просто увеличивается. На рис.4а и рис.5а представлено как изменяется переориентация, вызванная различной мощностью лазерного излучения, соответственно через 0.5 и 0.7 с после начала возникновения гидродинамического потока. Это необходимые периоды времени для окончательной переориентации молекул под действием лазерного излучения с мощностью 0.5 мВт/см².

Когда мы имеем малую энергию закрепления на нижней стенке, ориентация молекул вблизи этой стенки изменяется, стремясь стать планарной (рис.4а). А



Рис.4. Угол переориентации при наложении слабого граничного условия на нижнюю и сильного граничного условия на верхнюю стенки. Свет падает с правого края ячейки. (а) Угол между директором и осью *z* для различных *z* и мощностей лазера: кривая *l* соответствует начальному состоянию (t = 0 с, без переориентации). Остальные кривые соответствуют переориентации, вызванной через 0.5 с после запуска лазерного излучения. Кривая 2 - P = 0.05, кривая 3 - P = 0.5 и кривая 4 - P = 4 мВт/см². (b) Распределение угла переориентации по толщине ячейки и изменение во времени при фиксированной мощности 4 мВт/см².



Рис.5. Угол переориентации при наложении сильного граничного условия на нижнюю и слабого граничного условия на верхнюю стенки. Свет падает с правого края ячейки. (а) Угол между директором и осью *z* для различных *z* и мощностей лазера: кривая *l* соответствует начальному состоянию (t = 0 с). Остальные кривые соответствуют переориентации, вызванной через 0.7 с после запуска лазерного излучения. Кривая 2 - P = 0.05, кривая 3 - P = 0.5 и кривая 4 - P = 4 мВт/см². (b) Распределение угла переориентации по толщине ячейки и изменение во времени при фиксированной мощности P = 4 мВт/см².

когда мы имеем малую энергию закрепления на верхней стенке, где молекулы изначально ориентированы планарно, гидродинамический поток почти не изменяет ориентацию молекул на границах (рис.5а). Исследование переориентации в результате поглощения мощности лазера 0.05 мВт/см² показывает, что переориентация происходит медленно и угол переориентации незначителен. В случае высокой мощности – 4 мВт/см² кривизна становится больше и переориентация происходит быстрее (рис.4а и рис.4b).

В случае, когда свет падает на правый край ячейки, планарно-ориентированные молекулы почти не меняют своей ориентации и остаются планарными даже когда поверхностная энергия закрепления составляет 10⁻⁴ эрг/см². Это объясняется тем, что планарно- ориентированные молекулы имеют направление потока, которое считается предпочтительным для молекул.

5. Заключение

В работе представлен первоначально гибридно-ориентированный НЖК и изучены переориентации молекул в зависимости от граничных условий при различных мощностях лазерного излучения. Исходно гибридно-ориентированный НЖК представили в виде «гибкой ленты». Было установлено, что в случае, когда температурный поток направлен изнутри наружу кривизны «гибкой ленты» и мощность лазера не слишком высока, изменения кривизны не происходит, а большие потоки приводят к углублению кривизны. При направлении теплового потока вовнутрь кривизны «гибкой ленты» кривизна деформируется более существенно и деформация увеличивается со временем. «Гибкая лента» меняет знак своей кривизны в тот момент, когда энергия деформации становится больше энергии поверхностного закрепления на стенке с планарной начальной ориентацией, и принимает форму с меньшей энергией деформации. При этом гидродинамическая скорость направляется за пределы обращенной кривизны и приносит дополнительное небольшое увеличение кривизны. Время реверсирования зависит от параметров НЖК и энергии поверхностного сцепления. Последняя зависит от метода обработки поверхности. При более высоких интенсивностях процесс переориентации происходит быстрее. Разработка и реализация этой концепции может стать новым косвенным способом измерения энергии сцепления НЖК. Следует отметить, что в нашем случае лазерно-индуцированное гидродинамическое течение не имеет порога по интенсивности света, длина волны света связана только с поглощением и не использовалась в расчетах, расчеты являются общими для всех НЖК.

Все подтверждающие данные можно получить у авторов по соответствующему запросу.

Исследование выполнено при финансовой поддержке Комитета по высшему образованию и науке РА в рамках научного проекта № 21AG-1C088.

ЛИТЕРАТУРА

1. Y.K. Kim, B. Senyuk, O.D. Lavrentovich. Nat Commun., 3, 1133 (2012).

- 2. I. Nys. Liq. Cryst. Today., 29, 65 (2020).
- 3. R.S. Akopyan, N.V. Tabiryan, T. Tschudi. Phys. Rev. E, 49, 3143 (1994).

- D.V. Shmeliova, S.V. Pasechnik, S.S. Kharlamov, A.V. Dubtsov, A.V. Zakharov, S. Loebner, S. Santer. Symmetry, 15, 722 (2023).
- 5. R.S. Akopyan, R.B. Alaverdyan, L.Kh. Mouradian, H.Ye. Seferyan, Yu.S. Chilingarian. Quantum Electronics, 33, 81 (2003).
- 6. S. Shvetsov, T. Orlova, A. Hayrapetyan, A. Vasil'ev, M. Rafayelyan. Soft Matter, 20, 6920 (2024).
- 7. M. Sharma, M. Sharma, T. Ellenbogen. Laser Photonics Rev., 14, 2000253 (2020).
- 8. V.M. di Pietro, A. Jullien, U. Bortolozzo, N. Forget, S. Residori. Laser Phys Lett., 16, 015301 (2018).
- 9. I. Sliwa, P.V. Maslennikov, A.V. Zakharov. Phys. Rev. E, 103, 062702 (2021).
- 10. A.V. Zakharov, A.A. Vakulenko. J. Chem. Phys., 127, 084907 (2007).
- 11. A.V. Zakharov, A.A. Vakulenko. Phys. Solid State, 52, 1542 (2010).
- M. Škarabot, M. Maček Kržmanc, L. Rupnik, G. Lahajnar, D. Suvorov, I. Muševič. Liq. Cryst., 48, 385 (2021).
- L. Lucchetti, K. Kushnir, V. Reshetnyak, F. Ciciulla, A. Zaltron, C. Sada, F. Simoni. Opt. Mater., 73, 64 (2017).
- 14. O.D. Lavrentovich. Soft Matter, 10, 1264 (2014).
- 15. J. Oh, H.F. Gleeson, I. Dierking. Phys. Rev. E, 95, 22703 (2017).
- 16. T. Dadalyan, T. Galstian. Sci. Rep., 9, 12346 (2019).
- 17. T. Dadalyan, K. Petrosyan, R. Alaverdyan, R. Hakobyan. Liquid Crystals, 46, 694 (2019).
- 18. P.-G. De Gennes, J. Prost. The physics of liquid crystals, Oxford university press, 1993.
- 19. R.S. Hakobyan, K.M. Sargsyan, N.V. Tabirian. Mol. Cryst. Liq. Cryst., 453, 239 (2006).
- F. Simoni. Nonlinear Optical Properties of Liquid Crystals and PDLC, Teaneck, NJ: World Scientific, 1997.
- A. Marino, V. Tkachenko, E. Santamato, N. Bennis, X. Quintana, J.M. Otón, G. Abbate. J. Appl. Phys., 107, 073109 (2010).
- 22. P.R.G. Fernandes, K.A. da Silva, H. Mukai, E.C. Muniz. J. Mol. Liq., 229, 319 (2017).

LIGHT-INDUCED ABRUPT HYDRODYNAMIC INVERSION OF MOLECULAR ORIENTATION DIRECTION IN LIQUID CRYSTALS

V.S. HAKOBYAN, T.V. GALSTYAN, R.S. HAKOBYAN

The problem of laser-induced hydrodynamic reorientation (LIHR) of the director of a hybrid-oriented nematic liquid crystal (NLC) with arbitrary boundary conditions has been numerically solved. LIHR is studied at different laser powers and for two opposite directions of the temperature gradients. The hydrodynamic flow velocity gradient leads to a small increase in curvature when light creates temperature gradient in the out-of-curvature side of the hybrid orientation. The curvature changes sign when light creates temperature gradient from outside to inside the curvature of the hybrid orientation. The dependence of reorientation on the anchoring energy of molecules to the boundaries is also investigated.