

Energija in sile med topološkimi defekti v tekočem kristalu

Jan Gnamuš

Matematična fizika I, 2. letnik

4. 9. 2023

1 Naloga

Orientacijsko polje tekočega kristala okrog defektov lahko zapišemo kot $\phi(z) = \arg \prod (z - z_i)^{k_i}$, kjer so z_i lokacije defektov v kompleksni ravnini, k_i pa njihova ovojna števila. Kako se izraža energija in sile med defekti, če je gostota energije $|\nabla \phi|^2$, defekti pa imajo “jedro” polmera ϵ , ki je izključeno iz domene integracije?

2 Uvod

Tekoči kristal (ali tekoče-kristalna mezofaza) je termodinamska faza, ki ima lastnosti kapljevine in trdnine [1]. Glavna lastnost tekočega kristala je, da nima rigidne kristalne strukture, hkrati pa molekule v tekočem kristalu odražajo pozicijsko ali orientacijsko urejenost [1, 2]. Molekule so lokalno urejene vzdolž *direktorja*, njihovo urejenost pa lahko predstavimo s skalarnim orientacijskim poljem ali pa z direktorskim poljem. Direktorsko polje je vektorsko polje, ki predstavlja povprečno orientacijo molekul v tekočem kristalu. V tekočih kristalih se pojavljajo tudi topološki *defekti*. To so območja (točke ali premice), v katerih direktor ni dobro definiran in povprečna urejenost molekul močno pade [1, 3, 4]. Intuitivno si lahko predstavljamo, da direktorsko polje v okolici defekta zelo hitro spremeni smer (in so zato molekule znotraj jedra defekta praktično naključno orientirane) [5]. Deformacije direktorskega polja vodijo do napetosti v tekočem kristalu [6] in do pripadajočih elastičnih energij. V tej nalogi analiziram energije in sile med točkastimi defekti v 2D tekočem kristalu.

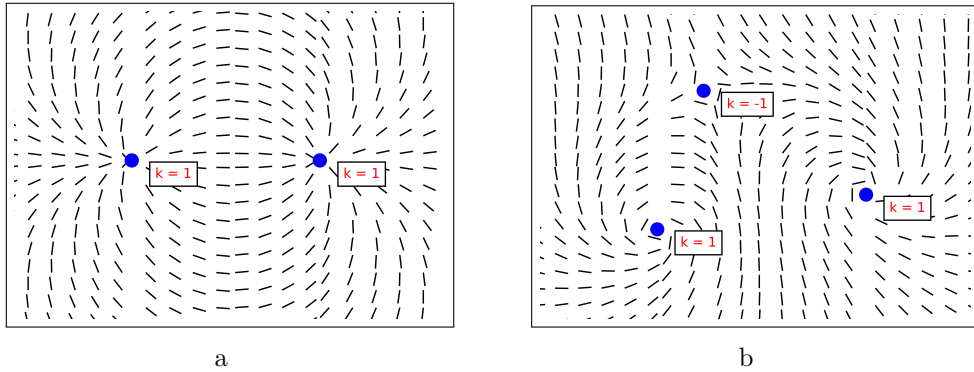
3 Orientacijsko polje

Orientacijsko polje 2D tekočega kristala okrog defektov lahko zapišemo kot $\phi(z) = \arg \prod (z - z_i)^{k_i}$, kjer so z_i lokacije defektov v kompleksni ravnini, k_i

pa njihova ovojna števila. To lahko zapišemo tudi kot

$$\begin{aligned}
\phi(z) &= \arg \prod (z - z_i)^{k_i} \\
&= \arg \prod ((x - x_i) + i(y - y_i))^{k_i} \\
&= \arg \prod |z - z_i|^{k_i} e^{i\varphi_i k_i} \\
&= \sum_i \varphi_i k_i,
\end{aligned} \tag{1}$$

kjer je $z = x + iy$ in $\varphi_i = \arctan\left(\frac{y-y_i}{x-x_i}\right)$. Oblika v enačbi (1) se največkrat pojavlja v knjigah o fiziki tekočih kristalov [2, 7]. Direktorsko polje $\mathbf{n}(\mathbf{r})$ lahko iz orientacijskega dobimo kot $\mathbf{n}(\mathbf{r}) = (\cos \phi(\mathbf{r}), \sin \phi(\mathbf{r}))$ [3, 8]. Defektom v tekočem kristalu lahko pripišemo *ovojno število* k , imenovano tudi *topološki naboj* [8] (ang. charge) ali *moč* [9] (ang. strength). Ta pove, kolikokrat direktorsko polje zaokroži okoli defekta, kar lahko zapišemo tudi kot $\int d\phi = 2\pi k$, kjer integriramo po neki zaključeni poti okoli jedra defekta [5]. Ker je direktorsko polje invariantno na zamenjavo glave in repa (simetrija glava - rep, $\mathbf{n} \rightarrow -\mathbf{n}$), so možna tudi ne-cela ovojna števila [6, 7]. Tipične vrednosti so ± 1 in $\pm 1/2$ [3, 10]. Primer direktorskega polja za konfiguracijo dveh in treh defektov je prikazan na sliki 1. Obravnava točkastih defektov v 2D tekočem kristalu je ekvivalentna obravnavi vzporednih defektnih premic v 3D, ki potekajo v smeri z osi [2, 9, 11]. V slednjem primeru dobimo 2D direktorsko polje s projekcijo direktorskega polja na xy ravnino.



Slika 1: Direktorsko polje dveh (a) in treh defektov (b). Modre pike so defekti, ovojna števila vsakega defekta pa so pripisana rdeče.

4 Energija defektov

Energijo defektov v tekočem kristalu lahko razdelimo na dva dela: (1) energijo jedra defekta in (2) elastično energijo [7]. Energija jedra je povezana s pokvarjeno orientacijo v jedru defekta in je v tej nalogi ne obravnavamo. Elastična energija je povezana z deformacijo direktorskega polja. V naslednjih razdelkih bomo videli, da tipično sestoji iz prispevkov energije vsakega defekta in prispevkov interakcijske energije med defekti [7]. V splošnem se energija defektov v 2D tekočem kristalu izračuna [12] z

$$E = \iint |\nabla \phi|^2 dS. \quad (2)$$

5 En defekt

Orientacijsko polje enega defekta se izraža kot

$$\phi = k_1 \arctan \left(\frac{y - y_1}{x - x_1} \right). \quad (3)$$

Za izračun energije izberimo izhodišče koordinatnega sistema tako, da je defekt v izhodišču, in uporabimo polarne koordinate. Najprej se izraz (3) poenostavi v

$$\begin{aligned} \phi &= k_1 \arctan(\tan(\varphi)) \\ &= k_1(\varphi + n\pi) \quad n = 0, 1, \dots \end{aligned}$$

Gradient skalarne polja f se v polarnih koordinatah izraža kot

$$\nabla f = \frac{\partial f}{\partial r} \hat{\mathbf{e}}_r + \frac{1}{r} \frac{\partial f}{\partial \theta} \hat{\mathbf{e}}_\theta,$$

torej je

$$\nabla \phi(r, \theta) = \frac{k_1}{r} \hat{\mathbf{e}}_\theta.$$

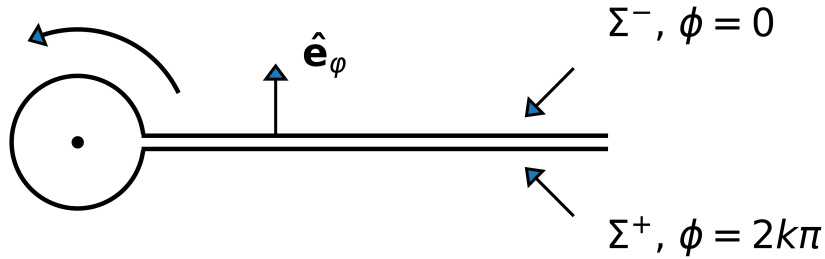
Za en defekt je torej energija

$$\begin{aligned} E &= \iint |\nabla \phi|^2 r dr d\varphi \\ &= k_1^2 \int_0^{2\pi} \int_\epsilon^R \frac{1}{r} dr d\varphi \\ &= 2\pi k_1^2 \ln \frac{R}{\epsilon}. \end{aligned} \quad (4)$$

V integralu po r je treba izbrati končno zgornjo in spodnjo mejo, sicer integral divergira. To naredimo tako, da za spodnjo mejo vzamemo radij jedra defekta ϵ , za zgornjo pa maksimalno velikost sistema R , ponavadi tako, da je $\epsilon \ll R$ [12]. Izraz (4) predstavlja energijo defekta v tekočem kristalu; to je elastična energija, ki je potrebna za uvedbo izoliranega defekta v tekoči kristal [12]. V neskončnem sloju ($R \rightarrow \infty$) bi defekt moral imeti neskončno energijo, vendar se to v praksi ne zgodi zaradi prisotnosti parov defektov z nasprotnim ovojnim številom [12]. Nastanek defektov z velikimi ovojnimi števili je energetsko neugoden, saj elastična energija raste s k^2 [1].

6 Dva defekta

Poglejmo si sedaj energijo dveh defektov. Tu je bolje uporabiti drugačen pristop, ki se lažje posploši na izračun interakcijske energije med defektoma in je uporabljen v (Chaikin et al., 1995 [7]). Obravnavajmo s tem pristopom najprej en izoliran defekt. Orientacijsko polje ϕ je podano z izrazom (3) in se nezvezno spremeni za $2\pi k$ vsakič, ko prečka pozitivni del x osi v nasprotni smeri urinega kazalca. Pri tem je k ovojno število defekta. Os x si lahko zato predstavljamo kot rez, ki ustvari dve namišljeni površini Σ^+ in Σ^- (poltraka), prikazani na sliki 2. Na vsaki površini ima ϕ konstantno vrednost; na Σ^- je $\phi = 0$, na Σ^+ pa $\phi = 2\pi k$. Ta rez je samo matematični pripomoček in nima fizikalnega pomena.



Slika 2: Rez (prirejeno po skici iz (Chaikin et al., 1995 [7]))

Sedaj integriramo izraz za energijo (2) po delih:

$$\iint (\nabla \phi)^2 dS = \iint \nabla \cdot (\phi \nabla \phi) dS - \iint \phi (\nabla^2 \phi) dS.$$

Drugi člen na desni je enak 0, ker je ϕ harmonična, prvi člen pa preoblikujemo s pomočjo Stokesovega izreka in izreka o divergenci in dobimo

$$\begin{aligned} E &= \iint (\nabla \phi)^2 dS = \int \phi^+ (\nabla \phi) \mathbf{n}^+ dr + \int \phi^- (\nabla \phi) \mathbf{n}^- dr \\ &= (\phi^+ - \phi^-) \int |\nabla \phi| dr \end{aligned} \quad (5)$$

$$\begin{aligned} &= 2\pi k \int_{\epsilon}^R \frac{k}{r} dr \\ &= 2\pi k^2 \ln \frac{R}{\epsilon}, \end{aligned} \quad (6)$$

kjer je $\phi^+ = 2k\pi$, $\phi^- = 0$, \mathbf{n}^+ enotska normala na površino Σ^+ (pravokotno na $d\mathbf{r}$), \mathbf{n}^- pa enotska normala na Σ^- . Pri prehodu v drugo vrstico (5) smo upoštevali, da sta na območju reza vektorja $\nabla \phi$ in \mathbf{n} vzporedna. Normala \mathbf{n}^+ namreč kaže v smeri $\hat{\mathbf{e}}_{\varphi}$, normala \mathbf{n}^- pa v smeri $-\hat{\mathbf{e}}_{\varphi}$. Izraz (6) je enak izrazu, ki smo ga dobili v poglavju 5.

Energija dveh defektov se lahko izračuna na podoben način. Orientacijsko polje dveh defektov v tekočem kristalu se izraža kot

$$\begin{aligned} \phi &= k_1 \arctan \left(\frac{y - y_1}{x - x_1} \right) + k_2 \arctan \left(\frac{y - y_2}{x - x_2} \right) \\ &=: \phi_1 + \phi_2. \end{aligned}$$

Tedaj je energija

$$\begin{aligned} E &= \iint (\nabla \phi_1 + \nabla \phi_2)^2 dS \\ &= E_1 + E_2 + \iint \nabla \phi_1 \nabla \phi_2 dS + \iint \nabla \phi_2 \nabla \phi_1 dS. \end{aligned} \quad (7)$$

Prispevka E_1 in E_2 v (7) sta prispevka vsakega defekta posebej in sta oblike kot v (4). Pri tem smo aproksimirali $\epsilon \ll r_{12} \ll R$, kjer je $r_{12} = |\mathbf{r}_{12}| = |\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1|$ razdalja med defektoma. Ta aproksimacija zagotavlja, da sta v primerjavi z dimenzijo sistema R jedri obeh defektov približno točkasti in da se oba defekta nahajata približno v izhodišču. Zato lahko za "lastni" prispevek energije vsakega defekta uporabimo kar rezultat (4), le z drugim

ovojnim številom. Zadnja dva integrala v (7) sta prispevka interakcijske energije in sta enaka, a ju pišemo tako, ker sedaj napravimo per partes na dva različna načina (za vsak integrand posebej). Postopamo podobno kot v enačbi (5). Prvi integral se izračuna kot

$$\begin{aligned}
\iint \nabla \phi_1 \nabla \phi_2 dS &= \iint \nabla \cdot (\phi_1 \nabla \phi_2) dS - \iint \phi_1 (\nabla^2 \phi_2) dS \\
&= (\phi_1^+ - \phi_1^-) \int |\nabla \phi_2| dr \\
&= 2\pi k_1 \int_{r_{12}}^R \frac{k_2}{r} dr \\
&= 2\pi k_1 k_2 \ln \frac{R}{r_{12}}.
\end{aligned}$$

Drugi integral je podoben, le zamenjamo indeksa in dobimo isti rezultat. Tako dobimo končni rezultat

$$\begin{aligned}
E &= E_1 + E_2 + 4\pi k_1 k_2 \ln \frac{R}{r_{12}} \\
\boxed{E &= 2\pi(k_1 + k_2)^2 \ln \frac{R}{\epsilon} + 4\pi k_1 k_2 \ln \frac{\epsilon}{r_{12}}}. \tag{8}
\end{aligned}$$

V zadnji vrstici smo v prvem členu skombinirali vse člene, odvisne od R (seštevanje in odštevanje logaritmov).

Sila med defektoma je tako

$$\boxed{\mathbf{F}_{12} = -\nabla E_{12} = -4\pi k_1 k_2 \frac{\mathbf{r}_{12}}{r_{12}^2}},$$

kjer je $\mathbf{r}_{12} = \mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1$ radij vektor, ki kaže od prvega k drugemu defektu.

Interakcijska energija med defektoma je analogna Coulombski elektrostatski energiji [5], le odvisnost od razdalje med naboje je tu drugačna: logaritemska za energijo, $1/r$ za silo, v primerjavi z $1/r$ odvisnostjo Coulombske energije in $1/r^2$ odvisnostjo sile med električnima naboje. Defekta z nasprotno predznačenima ovojima številoma (naboje) se privlačita, defekta z enako predznačenima pa odbijata.

Zanimivo je, da po anihilaciji dveh defektov, ki imata nasprotni naboj velikosti ena, za njima ne ostane noben defekt [13]. Če se anihilirata defekt s celim nabojem in defekt s polštevilskim nabojem, je tudi končni naboj polštevilski [13].

7 Več defektov

V primeru večih defektov se rezultat iz razdelka 6 ustrezno sploši na več defektov. Orientacijsko polje večih točkastih defektov v ravnini je

$$\phi = \sum_i \phi_i = \sum_i k_i \arctan \left(\frac{y - y_i}{x - x_i} \right).$$

Za energijo dobimo

$$E = \sum_i 2\pi k_i^2 \ln \frac{R}{\epsilon} + \sum_{\substack{i,j \\ j>i}} 4\pi k_i k_j \ln \frac{R}{r_{ij}},$$

sil a i-tega defekta na j-ti defekt pa je

$$\mathbf{F}_{ij} = -\nabla E_{ij} = -4\pi k_i k_j \frac{\mathbf{r}_{ij}}{r_{ij}^2},$$

kjer je $\mathbf{r}_{ij} = \mathbf{r}_j - \mathbf{r}_i$ radij vektor, ki kaže od i-tega k j-temu defektu.

8 Zaključek

V tekočih kristalih se pojavljajo topološki defekti, ki predstavljajo območja, v katerih urejenost molekul ni dobro definirana. Točkastim defektom pripišemo ovojno število, ki pove, kolikokrat se direktorsko polje ovije okoli defekta. Z uvedbo defektov v tekoči kristal je povezana elastična energija. Defekti med seboj interagirajo, oblika interakcijske energije med točkastimi defekti pa je podobna Coulombski interakcijski energiji med električnimi naboji. Defekta z nasprotno predznačenima ovojnim a številoma se privlačita, tista z enako predznačenima pa odbijata.

Viri in literatura

- [1] D. Andrienko, “Introduction to liquid crystals,” *Journal of Molecular Liquids*, vol. 267, pp. 520–541, 2018.
- [2] P.-G. De Gennes and J. Prost, *The physics of liquid crystals*. No. 83, Oxford university press, 1993.
- [3] G. Foffano, J. S. Lintuvuori, A. Tiribocchi, and D. Marenduzzo, “The dynamics of colloidal intrusions in liquid crystals: A simulation perspective,” *Liquid Crystals Reviews*, vol. 2, no. 1, pp. 1–27, 2014.
- [4] K. Harth and R. Stannarius, “Topological point defects of liquid crystals in quasi-two-dimensional geometries,” *Frontiers in Physics*, p. 112, 2020.
- [5] A. J. Vromans and L. Giomi, “Orientational properties of nematic disclinations,” *Soft matter*, vol. 12, no. 30, pp. 6490–6495, 2016.
- [6] L. M. Blinov, *Structure and properties of liquid crystals*, vol. 123. Springer Science & Business Media, 2010.
- [7] P. M. Chaikin, T. C. Lubensky, and T. A. Witten, *Principles of condensed matter physics*, vol. 10. Cambridge university press Cambridge, 1995.
- [8] X. Tang and J. V. Selinger, “Orientation of topological defects in 2d nematic liquid crystals,” *Soft matter*, vol. 13, no. 32, pp. 5481–5490, 2017.
- [9] M. Kleman and O. D. Lavrentovich, *Soft matter physics: an introduction*. Springer, 2003.
- [10] P. Raynes, “Liquid crystals—second edition, by s chandrasekhar, cambridge university press,(1992), isbn 0-521-41747-3 (hb), isbn 0-521-42741-x (pb),” 1993.
- [11] S. Chandrasekhar, *Liquid Crystals — Second Edition*. Cambridge University Press, 1992.
- [12] S. Chandrasekhar and G. Ranganath, “The structure and energetics of defects in liquid crystals,” *Advances in Physics*, vol. 35, no. 6, pp. 507–596, 1986.

- [13] D. Liang, X. Ma, and H. Huang, “Phase-field model of topological charge interaction force in nematic liquid crystals,” *Soft Materials*, vol. 19, no. 4, pp. 382–387, 2021.