

UNIVERZA V MARIBORU
FAKULTETA ZA NARAVOSLOVJE IN MATEMATIKO
Oddelek za fiziko

MAGISTRSKO DELO

Dejvid Črešnar

Maribor, 2018

UNIVERZA V MARIBORU
FAKULTETA ZA NARAVOSLOVJE IN MATEMATIKO
Oddelek za fiziko

Magistrsko delo

VPLIV NANODELCEV NA STOPNJO
NEMATIČNE UREDITVE

Mentor:

prof. dr. Samo Kralj

Kandidat:

Dejvid Črešnar

Somentor:

prof. dr. Zdravko Kutnjak

Maribor, 2018

V tem delu bi se rad iskreno zahvalil mentorju prof. dr. Samo Kralju in somentorju prof. dr. Zdravko Kutnjaku za pomoč in svetovanje pri izdelavi magistrskega dela.

Prav tako se zahvaljujem družini za vso podporo in potrpljenje v času mojega študija.

UNIVERZA V MARIBORU

FAKULTETA ZA NARAVOSLOVJE IN MATEMATIKO

IZJAVA

Podpisan Dejvid Črešnar, rojen 19. 2. 1990, študent Fakultete za naravoslovje in matematiko Univerze v Mariboru, študijskega programa Fizika, izjavljam, da je magistrsko delo z naslovom

VPLIV NANODELCEV NA STOPNJO NEMATIČNE UREDITVE

pri mentorju prof. dr. Samo Kralju in somentorju prof. dr. Zdravko Kutnjaku avtorsko delo. V magistrskem delu so uporabljeni viri in literatura korektno navedeni; teksti in druge oblike zapisov niso uporabljeni brez navedbe avtorjev.

Maribor, 9. julij 2018

Podpis: _____

UNIVERZA V MARIBORU
FAKULTETA ZA NARAVOSLOVJE IN MATEMATIKO

Črešnar D.: VPLIV NANODELCEV NA STOPNJO NEMATIČNE UREDITVE

Magistrsko delo, Univerza v Mariboru, Fakulteta za naravoslovje in matematiko, Oddelek za fiziko, 2018.

Izveček: Nanodelci dispergirani v nematičnih tekočih kristalih v splošnem deformirajo nematično strukturo. V številnih primerih dispergirani nanodelci vplivajo na tekočekristalno ureditev podobno kot naključno polje. Slednje vsiljuje molekulam tekočih kristalov relativno naključno orientacijsko urejenost, katere verjetnostna porazdelitev je odvisna predvsem od geometrije nanodelcev in jakosti ter vrste sklopitve med nanodelci in obdajajočo tekočo kristalno matriko. Nedavne eksperimentalne meritve nakazujejo, da pri povečevanju koncentracije nanodelcev preide klasična nematična ureditev v fazo, ki spominja na paranematično ureditev. Prehod je postopen in se izvede v relativno ozkem oknu koncentracij nanodelcev pri relativno nizki koncentraciji (okoli 0,1%). Pri nadaljnjem povečevanju se stopnja nematične urejenosti relativno malo spreminja do koncentracij 1%. Slednje obnašanje še ni bilo teoretično obravnavano. V magistrskem delu izdelamo minimalni matematični model, ki kvantitativno in kvalitativno opiše spremembo orientacijskega ureditvenega parametra v prisotnosti nanodelcev, ki vsiljujejo naključno urejenost. Izpeljemo dvodimenzionalni mrežni model v odvisnosti od ureditvenega parametra pri temperaturi absolutne ničle. V približku povprečnega polja numerično rešimo izpeljane enačbe. Rezultati simulacij v dobrem približku reproducirajo modelirane eksperimentalne meritve.

Ključne besede: tekoči kristali, nematična faza, orientacijski ureditveni parameter, nanodelci, naključno polje, model naključnega anizotropnega nematika, približek povprečnega polja

UNIVERZA V MARIBORU
FAKULTETA ZA NARAVOSLOVJE IN MATEMATIKO

**Črešnar D.: THE IMPACT ON NANOPARTICLES ON THE DEGREE OF THE
NEMATIC ORDERING**

**Master Thesis, University of Maribor, Faculty of Natural Sciences and
Mathematics, Department of Physics, 2018.**

Abstract: Nanoparticles dispersed in nematic liquid crystals generally deform the nematic structure. In numerous examples dispersed nanoparticles affect liquid crystal ordering in a similar way as a random field. The latter enforces a random orientational order on the liquid crystal molecules, whose probability distribution depends mainly on the geometry of the nanoparticles and on the strength and type of coupling between the nanoparticles and the surrounding liquid crystal matrix. Recent experimental measurements indicate, that upon increasing the concentration of nanoparticles, the classical nematic order transitions into a paranematic order like phase. The transition is gradual and appears at a relatively low concentration (around 0,1%) within a relatively narrow range of nanoparticle concentration. Further increasing the concentration of nanoparticles up to 1% has relatively little effect on the degree of nematic ordering. This behaviour has yet to be theoretically studied. In this master thesis we construct a minimal mathematical model, which qualitatively and quantitatively describes the change of the orientational order parameter due to the presence of nanoparticles, which enforce a random order. We derive a two-dimensional lattice model in terms of the order parameter at absolute zero kelvin. In the mean field approximation we numerically solve the equations of the derived model. The simulation results in a good approximation reproduce the modeled experimental results.

Key words: liquid crystals, nematic phase, orientational order parameter, nanoparticles, random field, random anisotropy nematic model, mean field approximation

KAZALO

1	UVOD	1
2	TEKOČI KRISTALI.....	3
2.1	NEMATIČNI TEKOČI KRISTALI.....	4
2.2	UREDITVENI PARAMETER.....	5
2.3	NAKLJUČNE MOTNJE V TEKOČIH KRISTALIH	8
2.4	TOPOLOGIJA IN NAKLJUČNE MOTNJE V TEKOČIH KRISTALIH.....	9
3	MODEL	13
3.1	NAKLJUČNO ANIZOTROPNI LEBWOHL-LASHER MODEL.....	13
3.2	PARAMETRIZACIJA	15
3.3	DINAMIKA SISTEMA	16
3.4	POVPREČNO POLJE.....	18
4	REZULTATI.....	20
4.1	EKSPERIMENTALNE MERITVE	20
4.2	NUMERIČNE SIMULACIJE	24
5	ZAKLJUČEK	30
6	LITERATURA	32

1 UVOD

V času osnovne in srednje šole se naučimo, da snov obstaja zgolj v treh agregatnih stanjih. Te so trdnine, kapljevine in plini. Trdnine najdemo v obliki kristalov ali amorfnih snovi. Najpomembnejša lastnost, ki ločuje trdnine in kapljevine, je pretok. Trdnine in kapljevine ločujemo tudi preko njunih optičnih lastnosti [1, 2]. Izkaže se, da določene organske snovi nimajo ostrega prehoda med trdno in tekočo (kapljevinsko) fazo, ampak prehode skozi več različnih faz, ki izkazujejo lastnosti trdnin in tekočin. Tem fazam v splošnem rečemo tekoči kristali (TK). Tekoči kristali, tako kot kapljevine, zavzamejo obliko posode v kateri se nahajajo, hkrati pa molekule obdržijo določeno orientacijsko in včasih tudi pozicijsko urejenost [2]. Lastnosti tekočih kristalov so predvsem odvisne od oblike molekul. Te so lahko paličaste oblike, diskaste oblike, v obliki banane, itd. [1, 2, 3]. Prehode med tekoče kristalnimi fazami lahko dosežemo na dva načina: s spremembo temperature in s spremembo koncentracije. Kadar dosežemo prehod z spremembo temperature, imamo opravka z termotropnimi tekočimi kristali, kadar pa prehod dosežemo z spremembo koncentracije, pa imamo opravka z liotropnimi tekočimi kristali [1].

Ponavljajoča se tematika pri obravnavi kondenzirane snovi je, da na obnašanje in odzive materiala velikokrat dominantno vplivajo prisotni topološki defekti (TD). Prav tako razumevanje sprememb materiala pri prehodu iz ene faze v drugo, temelji na dinamičnem obnašanju defektov, ki pogosto nastanejo v faznem prehodu. Primerna snov za raziskovanje defektov so TK. Slednji namreč vsebujejo raznovrstne konfiguracije TD, katerih analoge zasledimo praktično v vseh vejah fizike. TD so namreč izjemno pogosti v naravi in so topološko pogojeni. Posledično izkazujejo vrsto univerzalnih obnašanj, ki so neodvisne od mikroskopskih značilnosti sistema. V tej povezavi omenimo, da različne TK faze med seboj ločujemo glede na simetrije faze. Prehod med fazami karakterizira zlom določene simetrije, ki jo lahko opišemo z ureditvenim parametrom. Opisujejo, kako se stopnja urejenosti konfiguracije molekul v manj simetrični (bolj urejeni) fazi, razlikuje od bolj simetrične (manj urejene) faze [2]. Vse zlome simetrije spremljajo topološki defekti (TD). V centru defektov polje, ki opisuje fazni prehod, ni enolično določena.

Nadalje, v zadnjem desetletju se je izjemno povečalo zanimanje za interakcije med različnimi nanodelci (ND) in TD v tekoči matriki [4, 5]. TK med drugimi se uporabljajo kot sredstvo, s katerim lahko nadziramo urejenost različnih anizotropnih nanostruktur, kot so ogljikove nanocevke [6], nanoploščice [7], feromagnetni in feroelektrični nanodelci [8].

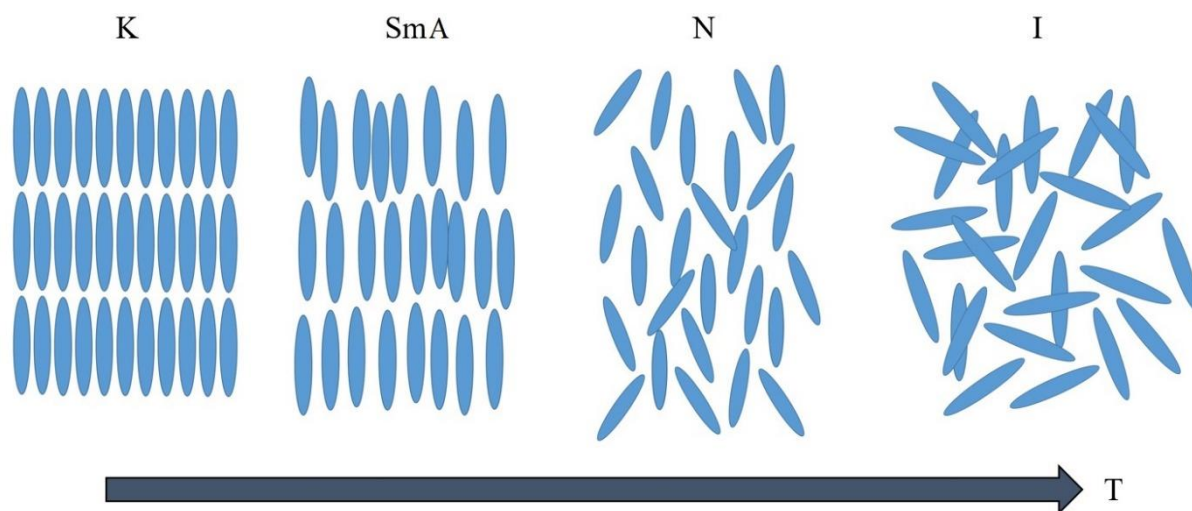
Prisotnost koloidnih delcev ali ND v TK matriki lahko vodi do motnje v nematičnem elastičnem polju, zaradi česar se lahko vzpostavijo interakcije dolgega dosega med delci. Te interakcije so v splošnem odvisne od velikosti in oblike ND, interakcije med TK molekulami in ND, ter elastičnimi lastnostmi TK. V splošnem lahko ND povzročijo nastanek dodatnih TD. Takšne primere zasledimo, če so ND močno sklopljeni z ureditvijo TK. V nasprotnem primeru (relativno šibka interakcija med ND in TK) pa lahko ND stabilizirajo strukture s TD. ND se namreč lahko ujamejo v jedra TD in s tem zmanjšajo njihov energijski prispevek [9]. Homogene mešanice TK in ND pogosto vodijo do novih in poudarjenih elektrooptičnih lastnosti [10, 11], spremembah v faznem obnašanju [12], stabilizaciji različnih struktur topoloških defektov [6, 13] in drugih pojavih. Za razumevanje raznovrstnosti pojavov, ki jih zasledimo v takšnih mešanicah, je potrebno fundamentalno razumevanje sklopitve, ki nastopajo v takšnih sistemih.

Najenostavnejši in tehnološko najpomembnejši so nematični tekoči kristali [2]. Karakteriziramo jih z orientacijskim redom, vzdolž skupne usmerjenosti, ki jo opišemo z nematskim direktorjem \vec{n} . Podolgovate molekule se v povprečju poravnajo vzdolž nematskega direktorja, kakovost te ureditve pa opišemo z orientacijskim ureditvenim parametrom. Večina naprav izkorišča anizotropijo TK, zaradi česar je kakovost ureditve molekul izjemno pomembna.

ND dispergirani v nematičnih TK v splošnem deformirajo nematično strukturo. Jakost deformacij je odvisna od elastičnih lastnosti medija in samih ND. V številnih primerih dispergirani ND vplivajo na tekočokristalno ureditev podobno kot naključno polje. Slednje vsiljuje TK molekulam relativno naključno orientacijsko urejenost, katere verjetnostna porazdelitev je odvisna predvsem od geometrije ND in jakosti ter vrste sklopitve med ND in obdajajočo TK matriko. Nedavne eksperimentalne meritve nakazuje, da pri povečevanju koncentracije ND preide klasična nematična preureditev v fazo, ki spominja na paranematično ureditev [14]. Prehod je postopen in se izvede v relativno ozkem oknu koncentracij ND pri relativno nizki koncentraciji (okoli 0.1%). Pri nadaljnjem povečevanju koncentracije se stopnja nematične urejenosti relativno malo spreminja do koncentracij 1%. Slednje obnašanje, na katero se osredotočimo v delu, še ni bilo teoretično obravnavano.

2 TEKOČI KRISTALI

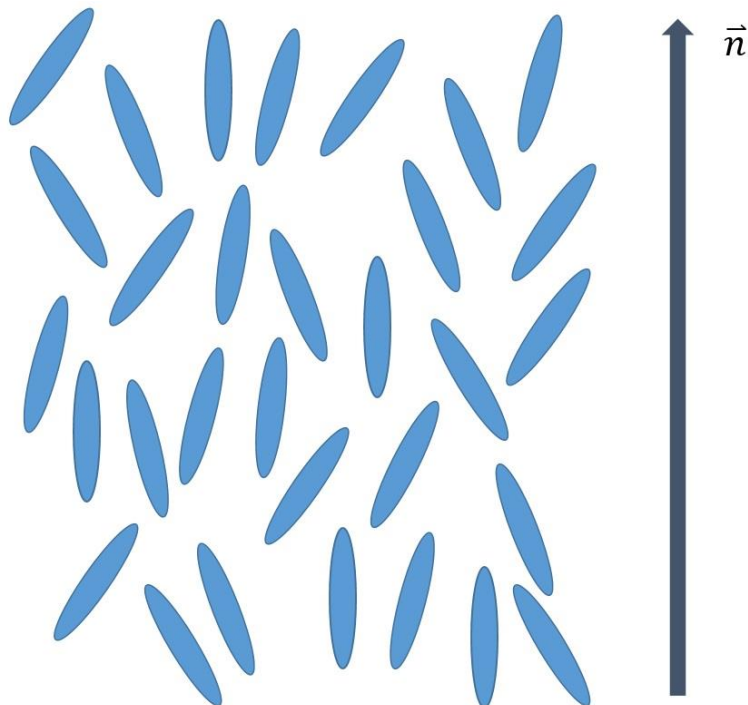
Veliko materialov, ki jih sestavljajo anizotropne organske molekule, pri prehodu med trdno in tekočo (izotropno) fazo preide še skozi vrsto vmesnih TK faz ob zvišanju temperature. TK faze izkazujejo kombinirane lastnosti kristalov in tekočin. Tekoči kristali, tako kot kapljevine, zavzamejo obliko posode v kateri se nahajajo, hkrati pa molekule obdržijo določeno orientacijsko in včasih tudi pozicijsko urejenost [2]. Glede na kakšen način dosežemo fazne prehode, ločimo TK v dve skupini: termotropne TK, kjer fazne prehode dosežemo s spremembo temperature in liotropne TK, kjer fazne prehode dosežemo s spremembo koncentracije TK v snovi. TK faze med seboj ločujemo glede na simetrije faze. Simetrije lahko kategoriziramo glede na stopnjo orientacijske in translacijske urejenosti. V izotropni (I) fazi anizotropne molekule ne izkazujejo nobene urejenosti. Pri nižanju temperature običajno preidemo v nematično (N) fazo, kjer so anizotropne molekule orientacijsko urejene. Molekule imajo težnjo po skupni usmerjenosti vzdolž lokalne izbrane smeri. Pogosto sledijo smektične faze, kjer so anizotropne molekule orientacijsko urejene, hkrati pa so težišča molekul periodično urejene. Najpreprostejša je smektična A (SmA) faza, ki je prikazana na sliki 1. Značilnost smektične A faze je, da so molekule urejene v smektične plasti, kjer so paličaste molekule orientirane vzdolž normale plasti. Pri dovolj nizkih temperaturah pa preidejo TK v kristalno (K) fazo (Slika 1).



Slika 1: Z višanjem temperature TK tipično preidejo skozi več tekočokristalnih faz. Pogosto sosledje faz je naslednje: Iz kristalne (K) faze preidejo v smektično A (SmA) fazo, sledi nematična (N) faza in nato še izotropna (I) faza.

2.1 NEMATIČNI TEKOČI KRISTALI

Najenostavnejša TK faza je nematična faza. Težišča anizotropnih molekul nimajo reda dolgega dosega, kar pomeni da se težišča molekul gibajo podobno kot v izotropni fazi. Značilnost nematične faze je, da se anizotropne molekule v povprečju orientirajo vzdolž določene smeri. To lokalno smer opišemo na mezoskopski skali z enotskim vektorjem \vec{n} , ki ga imenujemo nematski direktor (Slika 2). Anizotropni značaj se odraža pri številnih merljivih makroskopskih količinah, ki jih matematično opišemo s tenzorji. Običajni nematiki so optično enoosni materiali, kjer je optična os vzporedna z nematskim direktorjem \vec{n} . Izmerjena polarizacija vzdolž optične osi se razlikuje od izmerjene polarizacije pravokotno na optično os. Brez kakršnihkoli zunanjih vplivov je smer globalnega nematskega direktorja popolnoma naključna. V termodinamsko stabilni neograjeni nematični fazi pa je sistem homogeno urejen v izbrano smer. Omenjeni zlom rotacijske simetrije je podoben kot pri Heisenbergovem feromagnetu, kjer vsi spini v povprečju kažejo v enako smer, toda energija sistema ni odvisna od smeri globalne magnetizacije \vec{M} . Bistvena razlika med nematično in feromagnetno ureditvijo je enakovrednost orientacij $\pm\vec{n}$ v nematični fazi.



Slika 2: V ravnovesni nematični fazi v neograjnem TK se dolge osi TK molekul v povprečju orientirajo v smeri nematskega direktorja \vec{n} .

2.2 UREDITVENI PARAMETER

Številne fizikalne lastnosti TK so odvisne od smeri in jih matematično zapišemo s tenzorji. Na primer, relacija med magnetizacijo \vec{M} in zunanjim magnetnim poljem \vec{H} lahko pri majhnih vrednostih \vec{H} zapišemo kot

$$\vec{M} = \underline{\chi} \vec{H}, \quad (1)$$

kjer je $\underline{\chi}$ magnetna susceptibilnost. Oba vektorja imata tri komponente in v splošnem je vsaka komponenta magnetizacije M_α odvisna od vseh treh komponent magnetnega polja H_β :

$$M_\alpha = \chi_{\alpha\beta} H_\beta. \quad (2)$$

V enačbi (2) smo uporabili Einsteinov zapis, kjer ponavljajoč indeks β predstavlja vsoto po indeksu β . Podobno lahko v tenzorskem zapisu izrazimo električno in toplotno prevodnost, ter molekularno difuzijo nematika.

V 3-dimenzionalnem primeru, kjer je simetrijska os enosnosti vzporedna z osjo z , lahko tenzor $\underline{\chi}$ izrazimo kot

$$\underline{\chi} = \begin{pmatrix} \chi_\perp & 0 & 0 \\ 0 & \chi_\perp & 0 \\ 0 & 0 & \chi_\parallel \end{pmatrix}. \quad (3)$$

Pri tem je χ_\perp magnetna susceptibilnost v smeri pravokotno na simetrijsko os in χ_\parallel magnetna susceptibilnost v smeri vzporedno z simetrijsko os. V kolikor preidemo iz TK faze v izotropno fazo, vse anizotropne lastnosti postanejo izotropne in vse komponente tenzorja $\underline{\chi}$ postanejo enake. V splošnem lahko tenzor $\underline{\chi}$ razdelimo na izotropni del $\underline{\chi}_I$ in anizotropni del $\underline{\chi}_A$, ki izgine pri prehodu iz TK v izotropno fazo:

$$\underline{\chi} = \underline{\chi}_I + \underline{\chi}_A. \quad (4)$$

Vpeljemo povprečno lastno vrednost $\langle \chi \rangle$:

$$\langle \chi \rangle = \frac{1}{3}(\chi_{\perp} + \chi_{\perp} + \chi_{\parallel}). \quad (5)$$

Komponente anizotropnega dela lahko izrazimo kot:

$$\underline{\chi}_A = \underline{\chi} - \underline{\chi}_I = \begin{pmatrix} \chi_{\perp} & 0 & 0 \\ 0 & \chi_{\perp} & 0 \\ 0 & 0 & \chi_{\parallel} \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} \langle \chi \rangle & 0 & 0 \\ 0 & \langle \chi \rangle & 0 \\ 0 & 0 & \langle \chi \rangle \end{pmatrix} = \frac{1}{3} \begin{pmatrix} -\Delta\chi & 0 & 0 \\ 0 & -\Delta\chi & 0 \\ 0 & 0 & 2\Delta\chi \end{pmatrix}, \quad (6)$$

kjer je $\Delta\chi = \chi_{\parallel} - \chi_{\perp}$. Vidimo da je anizotropni tenzor brezsledni in je enak nič v izotropni fazi.

Tenzor lahko uporabimo kot merilo za orientacijski ureditveni parameter enoosne ureditve. Predpostavimo, da je 3-dimenzionalni tenzorski orientacijski ureditveni parameter sorazmeren z tenzorjem $\underline{\chi}_A$:

$$\underline{Q}^{(3D)} = A\underline{\chi}_A = A\Delta\chi(\underline{\bar{e}} \otimes \underline{\bar{e}} - \frac{1}{3}\underline{I}), \quad (7)$$

kjer je A sorazmernostna konstanta, \underline{I} je enotska matrika in $\underline{\bar{e}}$ je vektor, ki predstavlja smer simetrijske osi molekul. Običajno se sorazmernostna konstanta definira s pogojem:

$$A\Delta\chi = 1. \quad (8)$$

Tenzorski orientacijski ureditveni parameter je potem enak:

$$\underline{q}^{(3D)} = \underline{\bar{e}} \otimes \underline{\bar{e}} - \frac{1}{3}\underline{I}. \quad (9)$$

V tem zapisu je predpostavljeno, da imamo popolno enoosno orientacijo vzdolž vektorja $\underline{\bar{e}}$. Zaradi termičnih fluktuacij seveda pride do odstopanj od popolne enoosne orientacije. V takem primeru moramo potem gledati povprečno orientacijo celotnega sistema. Iz tega sledi, da je tenzorski orientacijski ureditveni parameter enak:

$$\underline{Q}^{(3D)} = \langle \underline{\bar{e}} \otimes \underline{\bar{e}} - \frac{1}{3}\underline{I} \rangle. \quad (10)$$

Kot smo že omenili, je za nematične TK značilno, da so simetrijske osi molekul v povprečju usmerjene v enako smer \vec{n} . V kolikor termične fluktuacije ohranjajo enoosnost, lahko tenzorski orientacijski ureditveni parameter izrazimo kot:

$$\underline{Q}^{(3D)} = \langle \vec{e} \otimes \vec{e} - \frac{1}{3} \underline{I} \rangle = S^{(3D)} \langle \vec{n} \otimes \vec{n} - \frac{1}{3} \underline{I} \rangle, \quad (11)$$

kjer je $S^{(3D)}$ enoosni ureditveni parameter in predstavlja mero povprečnega odstopanja od popolne enoosne orientacije vzdolž povprečne usmerjenosti \vec{n} . Produkt med vektorjem in tenzorjem, ki ga izrazimo z tenzorskim produktom dveh vektorjev, se po komponentah izrazi kot:

$$T_{\alpha\beta} n_{\beta} = (e_{\alpha} e_{\beta}) n_{\beta} = e_{\alpha} (e_{\beta} n_{\beta}), \quad (12)$$

kjer $e_{\beta} n_{\beta}$ predstavlja skalarni produkt teh dveh vektorjev. Ta izraz lahko sedaj izkoristimo za določitev enoosnega ureditvenega parametra $S^{(3D)}$. Tvorimo produkt med $\underline{Q}^{(3D)}$ in vektorjem \vec{n} :

$$\underline{Q}^{(3D)} \vec{n} = \langle \vec{e} (\vec{e} \cdot \vec{n}) - \frac{1}{3} \vec{n} \rangle = S^{(3D)} \langle \vec{n} (\vec{n} \cdot \vec{n}) - \frac{1}{3} \vec{n} \rangle = S^{(3D)} \langle \vec{n} - \frac{1}{3} \vec{n} \rangle. \quad (13)$$

Ta izraz skalarno množimo z vektorjem \vec{n} :

$$\vec{n} \cdot \underline{Q}^{(3D)} \vec{n} = \langle (\vec{e} \cdot \vec{n})^2 - \frac{1}{3} \rangle = S^{(3D)} \langle 1 - \frac{1}{3} \rangle = \frac{2}{3} S^{(3D)}. \quad (14)$$

Iz tega sledi izraz za enoosni ureditveni parameter $S^{(3D)}$:

$$S^{(3D)} = \frac{3}{2} \langle (\vec{e} \cdot \vec{n})^2 - \frac{1}{3} \rangle = \frac{1}{2} \langle 3 \cos^2 \theta - 1 \rangle. \quad (15)$$

Pri tem je θ kot med nematskim direktorjem \vec{n} in simetrijsko osjo molekule \vec{e} . Kot $\theta = 0$ predstavlja rigidno usmerjenost molekul vzdolž \vec{n} . Vrednosti, ki jih lahko zavzema enoosni ureditveni parameter $S^{(3D)}$, so v območju $S^{(3D)} \in [-1/2, 1]$. Izotropna porazdelitev orientacije \vec{e} se zrcali v vrednosti $S^{(3D)} = 0$.

V tej nalogi se bomo osredotočali na primer 2-dimenzionalnega nematika. Temu primerno moramo uvesti 2-dimenzionalni tenzorski orientacijski ureditveni parameter $\underline{Q}^{(2D)}$. To storimo tako, da enačbo (9) prilagodimo na 2D sistem:

$$\underline{Q}^{(2D)} = \vec{e} \otimes \vec{e} - \frac{1}{2}\underline{I}. \quad (16)$$

V tem zapisu je predpostavljeno, da imamo popolno enoosno orientacijo vzdolž vektorja \vec{e} . Podobno kot v 3-dimenzionalnem primeru termične fluktuacije povzročijo odstopanje od popolne enoosne orientacije, zaradi česar povprečimo orientacijo po celotni sistemu:

$$\underline{Q}^{(2D)} = \langle \vec{e} \otimes \vec{e} - \frac{1}{2}\underline{I} \rangle = S^{(2D)} \langle \vec{n} \otimes \vec{n} - \frac{1}{2}\underline{I} \rangle. \quad (17)$$

Sledimo 3D primeru in dobimo izraz za enoosni ureditveni parameter $S^{(2D)}$ za 2-dimenzionalni primer:

$$\vec{n} \cdot \underline{Q}^{(2D)} \vec{n} = \langle (\vec{e} \cdot \vec{n})^2 - \frac{1}{2} \rangle = \frac{1}{2} S^{(2D)}, \quad (18)$$

$$S^{(2D)} = \langle 2(\vec{e} \cdot \vec{n})^2 - 1 \rangle = \langle 2 \cos^2 \theta - 1 \rangle, \quad (19)$$

kjer $S^{(2D)}$ lahko zavzema vrednosti $S^{(2D)} \in [-1, 1]$.

2.3 NAKLJUČNE MOTNJE V TEKOČIH KRISTALIH

Na mnogih področjih mehke kondenzirane snovi, še posebej pri superfluidih, naključno motenih magnetih, elastomerih in tekočih kristalih, so bile izvedene številne raziskave, v katerih so preučevali vpliv nereda na makroskopsko fazno obnašanje. Vpliv slednjega je namreč velik, ker so omenjene nemotene faze dosežene z zlomom zvezne simetrije. Posebno veliko zanimanje je posvečeno obnašanju motenih, oziroma neurejenih TK faz [15]. Takšni sistemi igrajo pomembno vlogo pri raznih elektrooptičnih aplikacijah in poleg tega podajajo tudi vpogled v fundamentalno obnašanje narave. Izkazujejo mnogo univerzalnih lastnosti, ki jih lahko matematično povežemo z drugimi, pogosto fizikalno

povsem drugačnimi sistemi [16]. Zaradi mehкости, optične anizotropije in transparentnosti TK je te univerzalnosti eksperimentalno relativno preprosto obravnavati.

V perturbiranih TK so motnje geometrijsko inducirane preko površin, ki lokalno usmerjajo molekule TK. Eksperimentalno se takšne sisteme večinoma doseže ali z poroznimi matrikami [17], ki vsebujejo TK, ali z mešanicami aerosilnih delcev in TK [18]. Aerosilne mešanice so še posebej zanimive, saj lahko z spreminjanjem koncentracije aerosilnih delcev dobimo kvalitativno različne oblike nereda. Naključna ukrivljenost teh površin v splošnem nasprotuje preferenčni lokalni ureditvi in globalno vsiljuje izotropno orientacijsko porazdelitev. V primeru nematika to polje predstavlja nematski direktor, v primeru smektika pa predstavlja fazno polje smektičnih plasti. Študije kažejo, da naključnost pogosto povzroči domensko strukturo, ki jo pri dovolj majhnih motnjah lahko karakteriziramo z domensko dolžino ξ_d [19]. Imry in Ma sta kot prva napovedala nastanek takšnih domenskih struktur v magnetnih sistemih [20]. Tako imenovani Imry-Ma argument trdi, da poljubno šibka motnja povzroči nastanek domenskih struktur. Potrebna pogoja za nastanek domen sta, da se faze v kateri nastanejo domene dosežejo preko zveznega zloma simetrije in da je prostorska dimenzija sistema d manjša od 4. Ureditev dolgega dosega nemotenega sistema se posledično zamenja z ureditvijo kratkega dosega. Določene študije pa napovedujejo nastanek ureditve kvazi-dolgega dosega [17]. Posledično je vpliv šibkega nereda na sisteme z zlomljeno zvezno simetrijo še teoretično nedorečen.

2.4 TOPOLOGIJA IN NAKLJUČNE MOTNJE V TEKOČIH KRISTALIH

V mešanicah TK z koloidnimi delci ali nanodelci, slednji povzročijo nastanek motenj v sistemu. Te motnje so pogosto tipa naključnega polja, kjer se na različnih mestih v sistemu vsiljuje drugačna orientacijska ureditev molekul TK. Brez prisotnosti nanodelcev je orientacijski red homogen v smeri nematskega direktorja \vec{n} , če je vpliv ograjevanja zanemarljiv. Zaradi zloma zvezne simetrije pa lahko pride do nastanka topoloških defektov (TD) v polju nematskega direktorja, kjer \vec{n} ni več enolično določen. TD karakteriziramo z topološkim nabojem q [21].

Topološki naboji imajo pomembno vlogo pri klasifikaciji TD v kondenzirani snovi. Za splošno d -dimenzionalno enotsko vektorsko polje $\vec{n}^{(d)} = (n_1, n_2, \dots, n_d)$ v d -dimenzionalnem prostoru definiramo topološki naboj q kot

$$q^{(d)} = \frac{1}{\Pi^{(d)}} \oint \text{Det} \begin{vmatrix} n_1, \dots, n_d \\ \frac{\partial n_1}{\partial u_1}, \dots, \frac{\partial n_d}{\partial u_1} \\ \vdots \\ \frac{\partial n_1}{\partial u_{d-1}}, \dots, \frac{\partial n_d}{\partial u_{d-1}} \end{vmatrix} du_1 du_2 \dots du_{d-1}, \quad (20)$$

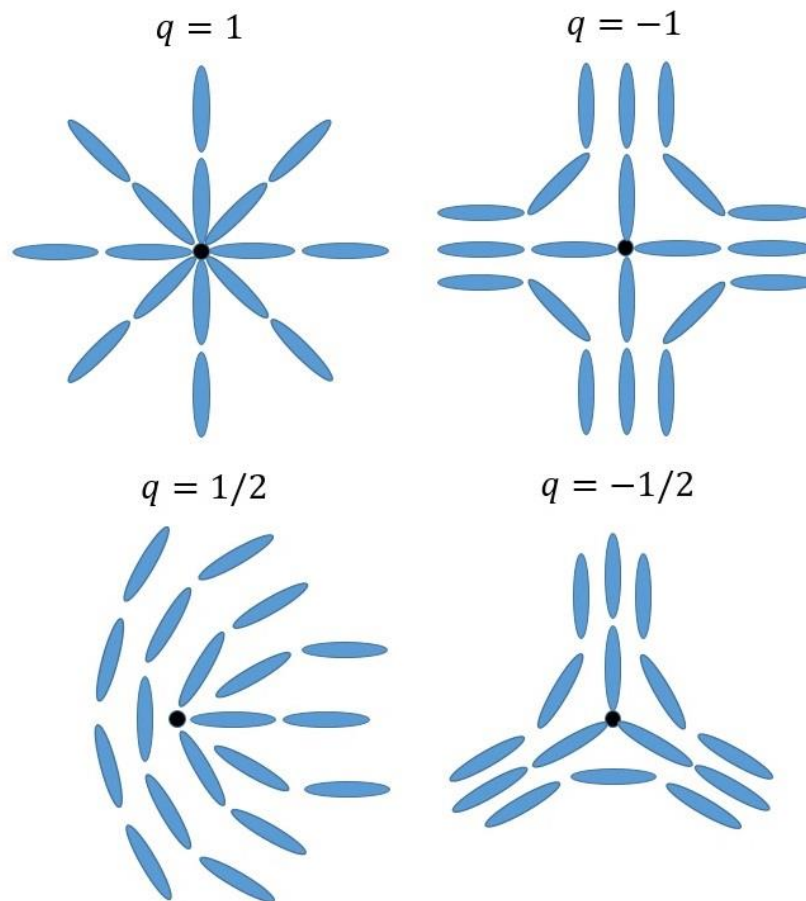
kjer je $\Pi^{(d)}$ je normalizacijska konstanta in u_1, u_2, \dots, u_{d-1} predstavljajo koordinate $(d - 1)$ -dimenzionalne sfere, ki obdaja TD. Za primer $d = 2$ velja $\vec{n}^{(2)} = (n_1, n_2)$, $\Pi^{(2)} = 2\pi$ in integracija steče po zaključeni zanki:

$$q^{(2)} = \frac{1}{2\pi} \oint (n_1 \frac{\partial n_2}{\partial u_1} - n_2 \frac{\partial n_1}{\partial u_1}) du_1. \quad (21)$$

Za primer $d = 3$ velja $\vec{n}^{(3)} = (n_1, n_2, n_3)$, $\Pi^{(3)} = 2\pi$ in integracija steče po zaključeni površini:

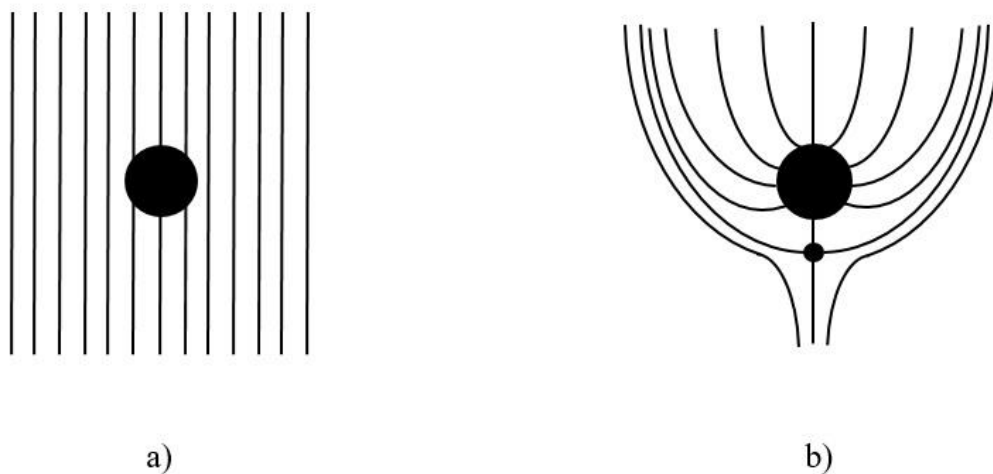
$$q^{(3)} = \frac{1}{2\pi} \oint \vec{n}^{(3)} \cdot \left(\frac{\partial \vec{n}^{(3)}}{\partial u_1} \times \frac{\partial \vec{n}^{(3)}}{\partial u_2} \right) du_1 du_2. \quad (22)$$

Stabilnost izoliranega sistema je zagotovljena preko ohranitve topološkega naboja. V kolikor defekt izkazuje radialno porazdelitev vektorskega polja $\vec{n}^{(d)}$ je topološki naboj $q^{(d)} = 1$. Hkrati je celotni topološki naboj vektorskega polja znotraj $(d - 1)$ -dimenzionalne sfere ohranjen. Ohranitveni zakoni za TD so analogni ohranitvenim zakonom za električni naboj. Ti zakoni narekujejo razpad, združevanje, anihilacijo in transformacijo TD. Tipično karakteriziramo nematične defekte z pozitivno vrednostjo q in nematične antidefekte z negativno vrednostjo q . Nematične defekte z $q = 1$ imenujemo nematični monopoli in defekte z $q = -1$ nematični antimonopoli (slika 3). Nematični monopoli in antimonopoli se med seboj privlačijo in se anihilirajo v stanje brez defektov $q = 0$. Celotni topološki naboj sistema se ohranja in je odvisen od robnih pogojev sistema. V dveh dimenzijah je topološki naboj enakovreden navojnemu številu.

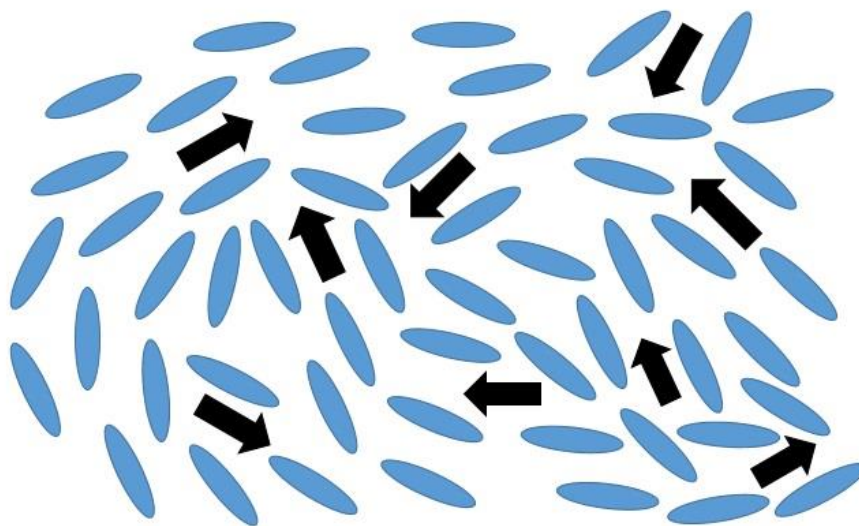


Slika 3: Primeri topoloških defektov z celoštevilčnim in polovičnim topološkim nabojem v 2-dimenzionalnem sistemu.

Predpostavilo, da nanodelci dispergirani v nematičnem TK vsiljujejo homeotropno sidranje molekul. V primeru šibkega sidranja na površini nanodelcev, elastični člen energije sistema vrača orientacijsko ureditev molekul nazaj v nemoteno stanje. Posledično imajo nanodelci zgolj vlogo razredčila, kjer zmanjšajo efektivno interakcijo med molekulami (slika 4). V kolikor robni pogoji sistema ne vsiljujejo topološkega naboja, je celotni topološki naboj sistema $q_{tot} = 0$. V primeru močnega sidranja pa ima vsak nanodelec efektivno vlogo nematičnega monopola z topološkim nabojem $q = 1$. Ohranitveni zakoni za TD vsilijo nastanek nematičnega antimonopola z $q = -1$ v TK matriki. V TK z primernimi elastičnimi lastnostmi tvorita nanodelec in nematični antimonopol efektivni topološki dipol (slika 4) [22]. Ta topološki dipol vsiljuje lokalno orientacijsko anizotropijo. V določenih primerih interakcija med nanodelci in TK povzroči nastanek mreže, kjer so nanodelci naključno porazdeljeni v TK matriki[23]. Posledično je lahko orientacijska porazdelitev topoloških dipolov v sistemu naključna. Takšna porazdelitev vsiljuje nekakšno naključno polje na okoliški TK medij (slika 5).



Slika 4: a) V primeru šibkega sidranja nanodelci ne zmotijo orientacijskega reda TK molekul. b) Shematski prikaz topološkega dipola. Nanodelci z homeotropnim sidranjem inducirajo nastanek topoloških dipolov. Nanodelci nosijo topološki naboj $q = 1$ in igrajo vlogo nematičnega monopola. Zaradi ohranitve celotnega topološkega naboja nastane v bližini nematični antimonopol z topološkim nabojem $q = -1$. Med seboj se ne moreta anihilirati, saj nanodelec ni TD.



Slika 5: Topološki dipoli vsiljujejo lokalno orientacijsko anizotropijo na okoliški TK medij. Orientacijska porazdelitev topoloških dipolov po prostoru je naključna in tvorijo nekakšno naključno polje.

3 MODEL

Za obravnavo naključno perturbiranih nematičnih TK bomo uporabili mrežni model naključnega anizotropnega nematika [24]. Ta model izhaja iz naključnega anizotropnega magnetnega modela [25], ki se uporablja pri obravnavi naključno motenih magnetnih sistemov. Hamiltonova funkcija za mrežo naključnega anizotropnega magnetnega modela se zapiše kot:

$$\mathcal{H} = -\frac{1}{2}\sum_i \sum_j J_{ij} \vec{s}_i \cdot \vec{s}_j - \sum_i w_i (\vec{s}_i \cdot \vec{e}_i)^2. \quad (23)$$

Vektor \vec{s}_i predstavlja n -dimenzionalni vektor spina na i -tem mestu v d -dimenzionalni mreži. Vsoti tečeta po vseh mestih na mreži. J_{ij} predstavlja jakost magnetne interakcije med i -tim in j -tim spinom. Za feromagnetne interakcije kratkega dosega je $J_{ij} = J > 0$ zgolj za najbližje sosede in $J_{ij} = 0$ za vse ostale pare. Pozitivna konstanta w_i predstavlja jakost lokalnega polja na i -tem mestu in želi poravnati spin \vec{s}_i z vektorjem $\pm \vec{e}_i$, kjer vektor \vec{e}_i na vsakem mestu i v mreži kaže v naključno smer. V nadaljevanju prilagodimo enačbo (23) za nematično TK fazo, ki ima drugačno simetrijo.

3.1 NAKLJUČNO ANIZOTROPNI LEBWOHL-LASHER MODEL

Hamiltonovo funkcijo za analogni model naključnega anizotropnega nematika zapišemo kot:

$$\mathcal{H} = -\frac{1}{2}\sum_i \sum_j J_{ij} (\vec{n}_i \cdot \vec{n}_j)^2 - \sum_i w_i (\vec{n}_i \cdot \vec{e}_i)^2. \quad (24)$$

Vektor \vec{n}_i predstavlja orientacijo paličastih molekul TK na i -tem mestu v mreži. Zaradi simetrične lastnosti $\vec{n}_i = -\vec{n}_i$ v Hamiltonovi funkciji niso prisotni linearni členi vektorja \vec{n}_i . Podobno kot prej predpostavimo, da velja $J_{ij} = J > 0$ zgolj za najbližje sosede in $J_{ij} = 0$ za vse ostale pare. Vektor \vec{e}_i kaže v naključno smer in se spreminja od mesta do mesta na mreži. Ta smer se lokalno vsiljuje v primeru kadar je $w_i > 0$. Le za določen delež p vseh mest je jakost polja $w_i = w > 0$, za ostale pa je $w_i = 0$.

V primeru, kjer velja $w = 0$ na vseh mestih, se model naključnega anizotropnega nematika pretvori v Lebwohl-Lasher model [26]. Uporablja se za opis faznega prehoda med izotropno

in nematsko fazo pri spremembi temperature. V kontinuumski sliki ima \mathcal{H} vlogo elastične proste energije v limiti enakih Frankovih elastičnih konstant [1].

Naš model je sestavljen iz d -dimenzionalne mreže in n -dimenzionalnih molekul nematičnega TK. Te molekule izpostavimo zunanemu polju in lokalnemu naključnemu polju. Model je posplošitev modela naključnega anizotropnega nematika [24]. V našem modelu se bomo osredotočili na primer, kjer je $d = n = 2$.

Orientacijske lastnosti molekul na mestu i v mreži, opišemo z brezslednim tenzorskim ureditvenim parametrom $\underline{Q}^{(i)}$, ki smo ga definirali v enačbi (16). V tem modelu ga poimenujemo tenzorski spin. Hamiltonovo funkcijo za tak mrežni model zapišemo kot:

$$\mathcal{H} = -\frac{1}{2}J \sum_{ns,ij} Q_{\alpha\beta}^{(i)} Q_{\alpha\beta}^{(j)} - H_{\alpha\beta} \sum_i Q_{\alpha\beta}^{(i)} - D \sum_i N_{\alpha\beta}^{(i)} Q_{\alpha\beta}^{(i)}. \quad (25)$$

Hamiltonova funkcija \mathcal{H} je sestavljena iz treh členov. Prvi člen predstavlja interakcijo med sosednjimi molekulami TK, ki favorizira vzporedno ureditev molekul. Konstanta $J > 0$ predstavlja jakost interakcije med najbližjimi sosedi (ns), faktor $1/2$ pa vključimo da se izognem dvojnemu štetju. Temu členu rečemo notranjo polje. Drugi člen opisuje sklopitev z zunanjim tenzorskim ureditvenim poljem $H_{\alpha\beta}$. Jakost polja definiramo z parametrom H in smer polja definiramo z dvema vektorjema \vec{e}_x in \vec{e}_y , ki sovpadata z osmi koordinatnega sistema:

$$H_{\alpha\beta} = 2H \left(e_{x,\alpha} e_{x,\beta} - \frac{1}{2} \delta_{\alpha\beta} \right) = -2H \left(e_{y,\alpha} e_{y,\beta} - \frac{1}{2} \delta_{\alpha\beta} \right). \quad (26)$$

Zadnji člen predstavlja sklopitev tenzorskih spinov z časovno neodvisnim lokalnim poljem jakosti $D > 0$, kjer je tenzor $N_{\alpha\beta}^{(i)}$ na mestu i v mreži definiran kot:

$$N_{\alpha\beta}^{(i)} = e_{\alpha}^{(i)} e_{\beta}^{(i)} - \frac{1}{2} \delta_{\alpha\beta}. \quad (27)$$

Vektor $\vec{e}^{(i)}$ predstavlja naključno smer polja na mestu i v mreži. Smeri vektorjev $\vec{e}^{(i)}$ se med seboj razlikujejo od mesta do mesta na mreži in so nekorelirane. Ta člen modelira naključno polje. Razlika med zunanjim in naključnim poljem je, da zunanjo polje želi usmeriti vsako molekulo na mreži v smeri zunanjega polja, medtem ko želi naključno polje

usmeriti posamezno molekulo v smeri lokalnega naključnega polja, si se razlikuje od mesta do mesta na mreži.

3.2 PARAMETRIZACIJA

V kartezičnem koordinatnem sistemu lahko vse člene Hamiltonove funkcije \mathcal{H} parametriziramo v odvisnosti od smeri lokalnega spina $\vec{n}^{(i)} = (\cos \theta_i, \sin \theta_i)$ in smeri lokalnega naključnega polja $\vec{e}^{(i)} = (\cos \alpha_i, \sin \alpha_i)$. Potemtakem se enačba (16) pretvori v:

$$\underline{Q}^{(i)} = \begin{pmatrix} \cos^2 \theta_i - \frac{1}{2} & \cos \theta_i \sin \theta_i \\ \cos \theta_i \sin \theta_i & \sin^2 \theta_i - \frac{1}{2} \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} \cos 2\theta_i & \sin 2\theta_i \\ \sin 2\theta_i & -\cos 2\theta_i \end{pmatrix}, \quad (28)$$

enačba (26) v:

$$\underline{H} = 2H \begin{pmatrix} 1 - \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 1 - \frac{1}{2} \end{pmatrix} = H \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad (29)$$

in enačba (27) v:

$$\underline{N}^{(i)} = \begin{pmatrix} \cos^2 \alpha_i - \frac{1}{2} & \cos \alpha_i \sin \alpha_i \\ \cos \alpha_i \sin \alpha_i & \sin^2 \alpha_i - \frac{1}{2} \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} \cos 2\alpha_i & \sin 2\alpha_i \\ \sin 2\alpha_i & -\cos 2\alpha_i \end{pmatrix}. \quad (30)$$

Hamiltonovo funkcijo \mathcal{H} lahko sedaj izrazimo v odvisnosti od kotov $\{\theta_i, \alpha_i\}$:

$$\mathcal{H} = -\frac{1}{4}J \sum_{ns,ij} \cos 2(\theta_i - \theta_j) - H \sum_i \cos 2\theta_i - \frac{D}{2} \sum_i \cos 2(\theta_i - \alpha_i). \quad (31)$$

Enačba (31) ima podobno obliko kot Hamiltonova funkcija v klasičnem XY modelu naključnega polja vektorskih spinov:

$$\mathcal{H}^* = -\frac{1}{2}\tilde{J} \sum_{ns,ij} \cos(\theta_i - \theta_j) - \tilde{H} \sum_i \cos \theta_i - \tilde{D} \sum_i \cos(\theta_i - \alpha_i), \quad (32)$$

kjer je \tilde{J} energija lokalne interakcije spinov, \tilde{H} je zunanje magnetno polje in \tilde{D} je sklopitvena konstanta med spini in lokalnim naključnim poljem. Sklepamo da bodo rezultati statistično

mehanskih izračunov prikazovali določene podobnosti med obema sistemoma. Prav tako opazimo, da je energija zunanega polja na mestu i enaka $-H \cos 2\theta_i$. Torej za pozitivne vrednosti parametra H , želi polje poravnati molekule v smeri x -osi, medtem ko za negativne vrednosti želi poravnati molekule v smeri y -osi. Energija naključnega polja na mestu i pa je $-(1/2)D \cos 2(\theta_i - \alpha_i)$, kjer sta pri dovolj velikih vrednostih D kota θ_i in α_i enaka.

Mi se želimo osredotočiti na povprečni odziv mreže kot celote. Definiramo povprečni tenzorski ureditveni parameter:

$$\underline{S} = \langle \underline{Q}^{(i)} \rangle = \begin{pmatrix} S_{xx} & S_{xy} \\ S_{yx} & S_{yy} \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} \eta & \zeta \\ \zeta & -\eta \end{pmatrix}, \quad (33)$$

kjer $\langle \dots \rangle$ predstavlja povprečenje po celotni mreži. Ključna ureditvena parametra sta potem:

$$\eta = \langle \cos 2\theta_i \rangle = \frac{1}{N} \sum_i \cos 2\theta_i, \quad (34)$$

in:

$$\zeta = \langle \sin 2\theta_i \rangle = \frac{1}{N} \sum_i \sin 2\theta_i, \quad (35)$$

kjer vsota poteka po vseh N mestih na mreži. V limitah $H \rightarrow \pm\infty$, kjer je zunanjo polje dominantni člen, limitira ureditveni parameter $\eta(H \rightarrow +\infty) \rightarrow 1$ in $\eta(H \rightarrow -\infty) \rightarrow -1$. Ta dva rezultata predstavljata rotacijo od x -osi proti y -osi, ko gre H od $+\infty$ do $-\infty$. Povprečni tenzorski ureditveni parameter \underline{S} se odzove na polje \underline{H} . Iz tega sklepamo, da glavne osi \underline{S} sovpadajo z glavnimi osmi polja \underline{H} . V takšnem koordinatnem sistemu ureditveni parameter ζ predstavlja izven diagonalne elemente. V splošnem lahko zaradi simetrije sistema predpostavimo, da je ureditveni parameter $\zeta = 0$.

3.3 DINAMIKA SISTEMA

Obravnavajmo dinamično obnašanje sistema. V ta namen vpeljemo lokalno polje na mestu i :

$$G_{\alpha\beta}^{(i)} = -\frac{\delta\mathcal{H}}{\delta Q_{\alpha\beta}^{(i)}} = H_{\alpha\beta} + DN_{\alpha\beta}^{(i)} + J \sum_{ns, i \neq j} Q_{\alpha\beta}^{(j)}, \quad (36)$$

kjer je polje $G_{\alpha\beta}^{(i)}$ simetrično in brezsledno. Minimizacija lokalne energije vsiljuje pogoj:

$$\mathcal{H}^{(i)} = -G_{\alpha\beta}^{(i)} Q_{\alpha\beta}^{(i)}. \quad (37)$$

Dinamiko sistema poteka po diskretnih časih tako, da $Q_{\alpha\beta}^{(i)}(t+1)$ minimizira $-G_{\alpha\beta}^{(i)}(t)Q_{\alpha\beta}^{(i)}(t+1)$. Zagotoviti moramo samo da glavne osi od $Q_{\alpha\beta}^{(i)}(t+1)$ sovpadajo z glavnimi osmi od $G_{\alpha\beta}^{(i)}(t)$ in da enačba (16) pravilno normalizira $Q_{\alpha\beta}^{(i)}(t+1)$. Iz tega sledi:

$$\underline{Q}^{(i)}(t+1) = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} \cos 2\theta_i(t+1) & \sin 2\theta_i(t+1) \\ \sin 2\theta_i(t+1) & -\cos 2\theta_i(t+1) \end{pmatrix} = \lambda^{(i)} \underline{G}^{(i)}(t), \quad (38)$$

kjer je $\lambda^{(i)}$ normalizacijska konstanta. Izračunamo jo na sledeč način:

$$\begin{aligned} \sum_{\alpha,\beta} \left(Q_{\alpha\beta}^{(i)}(t+1) \right)^2 &= (\lambda^{(i)})^2 \sum_{\alpha,\beta} \left(G_{\alpha\beta}^{(i)}(t) \right)^2 = \\ &= 2(\lambda^{(i)})^2 \left(\left(G_{11}^{(i)}(t) \right)^2 + \left(G_{12}^{(i)}(t) \right)^2 \right) = \frac{1}{2}. \end{aligned} \quad (39)$$

Iz tega sledi, da je normalizacijska konstanta enaka:

$$\lambda^{(i)} = \frac{1}{2 \sqrt{\left(G_{11}^{(i)}(t) \right)^2 + \left(G_{12}^{(i)}(t) \right)^2}}. \quad (40)$$

Pri začetni porazdelitvi naključnega tenzorskega polja $N_{\alpha\beta}^{(i)}$ in začetni porazdelitvi spinov $Q_{\alpha\beta}^{(i)}(0)$, se diskretna dinamika iterativno razvija tako dolgo, dokler ne dosežemo stabilne porazdelitve ali kadar se vrednosti spinov ne spreminjajo več. Iz enačbe (36) sledi:

$$\frac{1}{2} \begin{pmatrix} \cos 2\theta_i & \sin 2\theta_i \\ \sin 2\theta_i & -\cos 2\theta_i \end{pmatrix} = \frac{1}{2 \sqrt{\left(G_{11}^{(i)}(t) \right)^2 + \left(G_{12}^{(i)}(t) \right)^2}} \begin{pmatrix} G_{11}^{(i)} & G_{12}^{(i)} \\ G_{12}^{(i)} & -G_{11}^{(i)} \end{pmatrix}. \quad (41)$$

Ta rešitev predstavlja lokalni minimum energije, ne pa nujno tudi globalni minimum. Lokalno polje kombinira naključno polje, notranjo polje in zunanjo polje. Katera od teh členov prevladuje je odvisno od številnih faktorjev. V primeru kjer je jakost zunanjega polja veliko večja v primerjavi z ostalima dvema, predstavljata druga dva člena majhno perturbacijo. Prav tako, kadar je notranjo polje majhno v primerjavi z naključnim poljem, ne more igrati kakršnekoli pomembne vloge.

3.4 POVPREČNO POLJE

Naš sistem želimo sedaj opisati z povprečnim poljem. Za tak opis je potrebno zanemariti korelacije med mesti v mreži, kar vodi do povprečnega lokalnega polja na mestu i v mreži:

$$\bar{G}_{\alpha\beta}^{(i)} = H_{\alpha\beta} + DN_{\alpha\beta}^{(i)} + JzS_{\alpha\beta}, \quad (42)$$

kjer z predstavlja število najbližjih sosedov v mreži. Za naš 2-dimenzionalni primer je $z = 4$. Za simetrično rešitev lahko povprečni tenzorski ureditveni parameter \underline{S} izrazimo samo z enim parametrom:

$$\underline{S} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} \eta & 0 \\ 0 & -\eta \end{pmatrix}, \quad (43)$$

povprečno lokalno polje $\bar{G}^{(i)}$ pa je:

$$\bar{G}^{(i)} = \begin{pmatrix} H + \frac{1}{2}D \cos 2\alpha_i + \frac{1}{2}Jz\eta & \frac{1}{2}D \sin 2\alpha_i \\ \frac{1}{2}D \sin 2\alpha_i & -H - \frac{1}{2}D \cos 2\alpha_i - \frac{1}{2}Jz\eta \end{pmatrix}. \quad (44)$$

Podobno kot prej zahtevamo da glavne osi od $Q_{\alpha\beta}^{(i)}$ sovpadajo z glavnimi osmi od $\bar{G}_{\alpha\beta}^{(i)}$. Sledi:

$$\frac{1}{2} \begin{pmatrix} \cos 2\theta_i & \sin 2\theta_i \\ \sin 2\theta_i & -\cos 2\theta_i \end{pmatrix} = \lambda^{(i)} \begin{pmatrix} H + \frac{1}{2}D \cos 2\alpha_i + \frac{1}{2}Jz\eta & \frac{1}{2}D \sin 2\alpha_i \\ \frac{1}{2}D \sin 2\alpha_i & -H - \frac{1}{2}D \cos 2\alpha_i - \frac{1}{2}Jz\eta \end{pmatrix}. \quad (45)$$

Enačba za kot θ_i se potem zapiše kot:

$$\cos 2\theta_i = \frac{H + \frac{1}{2}D \cos 2\alpha_i + \frac{1}{2}Jz\eta}{\sqrt{\left(H + \frac{1}{2}D \cos 2\alpha_i + \frac{1}{2}Jz\eta\right)^2 + \frac{1}{4}D^2 \sin^2 2\alpha_i}}. \quad (46)$$

Ureditveni parameter η lahko sedaj izračunamo tako, da povprečimo enačbo (46):

$$\eta = \frac{1}{\pi} \int_0^\pi \langle \cos 2\theta_i(\alpha) \rangle d\alpha, \quad (47)$$

kar vodi do končne enačbe:

$$\eta = \frac{1}{\pi} \int_0^\pi f(\alpha) \frac{H + \frac{1}{2}D \cos 2\alpha_i + \frac{1}{2}Jz\eta}{\sqrt{\left(H + \frac{1}{2}D \cos 2\alpha_i + \frac{1}{2}Jz\eta\right)^2 + \frac{1}{4}D^2 \sin^2 2\alpha_i}} d\alpha. \quad (48)$$

Vidimo, da η nastopa na levi in desni strani enačbe, kar rešujemo numerično. Pri tem $f(\alpha)$ opisuje verjetnostno porazdelitev orientacije \vec{e}_i in je odvisna od vzorca. Mi si bomo ogledali dve možni obliki porazdelitvene funkcije $f(\alpha)$. V prvem primeru bomo predpostavili izotropno porazdelitev:

$$f_{Izo}(\alpha) = 1/\alpha_L, \quad (49)$$

kjer velja $0 < \alpha \leq \alpha_L$ in α_L je limitni kot, ki leži med 0 in π . Limitni kot je molelni prosti parameter. V drugem primeru pa bomo predpostavili, da je $f(\alpha)$ Gaussova porazdelitvena funkcija:

$$f_{Gauss}(\alpha) = C e^{-\frac{(\alpha-\mu)^2}{2\sigma^2}}, \quad (50)$$

kjer je C normalizacijska konstanta, μ je povprečna vrednost kota α po celotnem sistemu in σ je varianca.

4 REZULTATI

V nadaljevanju preučujemo vpliv naključnega polja na globalno ureditev nematičnega TK. Najprej predstavimo ustrezne eksperimentalne meritve, ki so bile izvedene na nacionalnem centru za znanstveno raziskovanje Demokritos v Grčiji. Sledi ustrezna numerična analiza.

4.1 EKSPERIMENTALNE MERITVE

Ustreznost matematičnega modela določimo s primerjavo rezultatov matematičnega modela in eksperimentalnih meritev fizikalnega sistema. Za primerjavo bomo uporabili rezultate eksperimentalne meritve orientacijskega ureditvenega parametra nematičnega TK v odvisnosti od temperature pri različnih koncentracijah sferičnih ND, ki ga je izvedla ekipa pod vodstvom I. Lelidisa [14].

Za TK matriko se je uporabljal TK 5008 (4-n-pentiloksifenil-4'-n-oktiloksibenzoat), katere molekularna formula je $C_{26}H_{36}O_4$. Nanodelci so kvantne pike, kjer je sferično jedro sestavljeno iz CdSe in lupina iz ZnS. Premer jedra je 6,7 nm, debelina lupine pa 0,6 nm. Površina lupine je prekrita z hidrofobno plastjo sestavljene iz trioktilfosfin oksida (TOPO) z kemično formulo $OP(C_8H_{17})_3$. Debelina plasti je približno 0,7 nm. Kvantne pike z TOPO plastjo so tipično premera 9,3 nm.

Mešanice TK in ND so bile pripravljene na sledeč način. ND in TK se posebej dispergira v toluen. Mešanico ND in toluena se izpostavi eno-urni sonikaciji. Sledi združitev obeh mešanic, ki je nato izpostavljena sonikaciji za približno dve uri. Toluena se počasi izpareva ob prisotnosti magnetnega mešala. Preučevali so mešanice koncentracije $c_1 = 0,001$, $c_2 = 0,0025$, $c_3 = 0,0035$, $c_4 = 0,004$ in $c_5 = 0,01$. Pri tem koncentracijo definiramo kot razmerje med maso dispergiranih ND m_{ND} in maso celotne mešanice $m = m_{TK} + m_{ND}$. Te mešanice se nato vstavijo v planarne in homeotropne celice. Celice se opazuje pod polariziranim Ramanskim spektroskopom in polariziranim optičnim mikroskopom pri različnih temperaturah. Rezultate meritev predstavimo v naslednjih tabelah.

ΔT [K]	$\langle \cos^2 \theta \rangle$	$S^{(3D)}$
20,7	0,781	0,672
15,7	0,758	0,637
10,7	0,739	0,609
5,7	0,724	0,586
0,7	0,678	0,508

Tabela 1: Temperaturna odvisnost orientacijskega ureditvenega parametra $S^{(3D)}$ za TK brez prisotnosti ND. Temperatura ΔT je definirana kot razlika med temperaturo faznega prehoda med izotropno in nematično fazo T_{NI} , ter temperaturo vzorca T [14].

ΔT [K]	$\langle \cos^2 \theta \rangle$	$S^{(3D)}$
20,6	0,798	0,697
15,6	0,761	0,642
10,6	0,705	0,558
5,6	0,699	0,549
1,6	0,655	0,483

Tabela 2: Temperaturna odvisnost orientacijskega ureditvenega parametra $S^{(3D)}$ za mešanico TK in ND s koncentracijo $c_1 = 0,001$ [14].

ΔT [K]	$\langle \cos^2 \theta \rangle$	$S^{(3D)}$
20,4	0,746	0,619
15,4	0,721	0,582
10,4	0,709	0,564
5,4	0,696	0,544
0,4	0,527	0,291
0,2	0,515	0,273

Tabela 3: Temperaturna odvisnost orientacijskega ureditvenega parametra $S^{(3D)}$ za mešanico TK in ND s koncentracijo $c_2 = 0,0025$ [14].

ΔT [K]	$\langle \cos^2 \theta \rangle$	$S^{(3D)}$
18	0,649	0,474
15	0,629	0,444
10	0,619	0,429
5	0,604	0,406
1	0,519	0,279

Tabela 4: Temperaturna odvisnost orientacijskega ureditvenega parametra $S^{(3D)}$ za mešanico TK in ND s koncentracijo $c_3 = 0,0035$ [14].

ΔT [K]	$\langle \cos^2 \theta \rangle$	$S^{(3D)}$
19,7	0,559	0,339
14,7	0,511	0,267
9,7	0,502	0,253
4,7	0,433	0,150
0,7	0,432	0,148

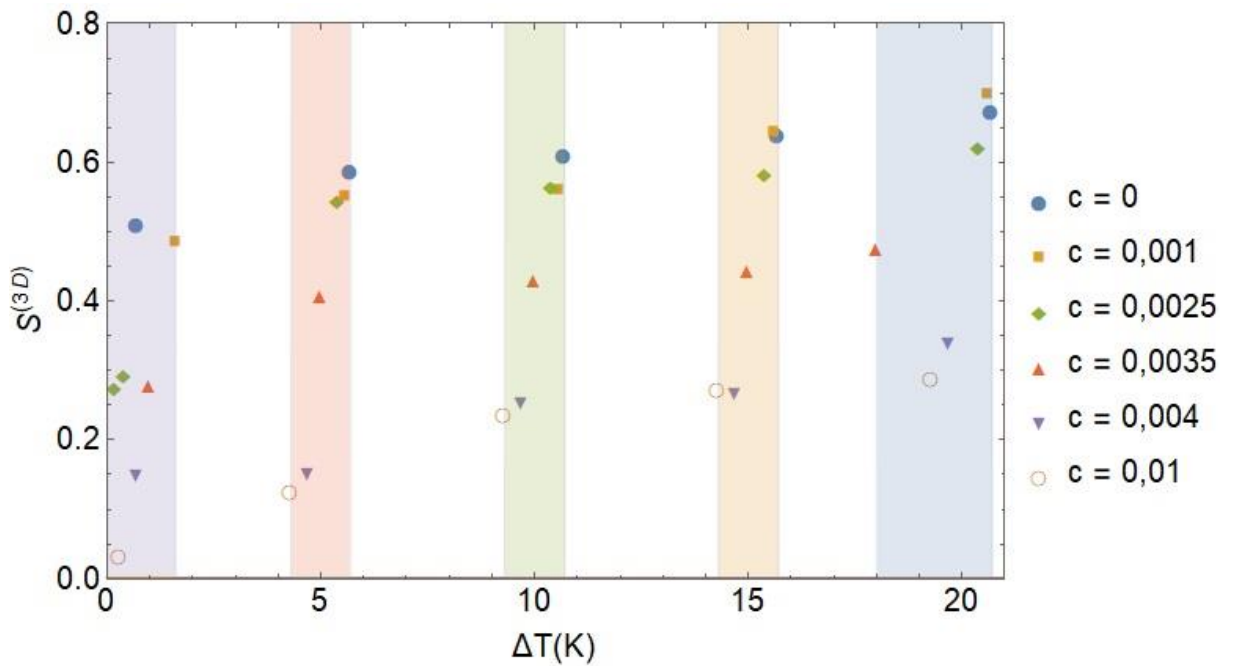
Tabela 5: Temperaturna odvisnost orientacijskega ureditvenega parametra $S^{(3D)}$ za mešanico TK in ND s koncentracijo $c_4 = 0,004$ [14].

ΔT [K]	$\langle \cos^2 \theta \rangle$	$S^{(3D)}$
19,3	0,524	0,286
14,3	0,514	0,271
9,3	0,490	0,235
4,3	0,415	0,123
0,3	0,353	0,030

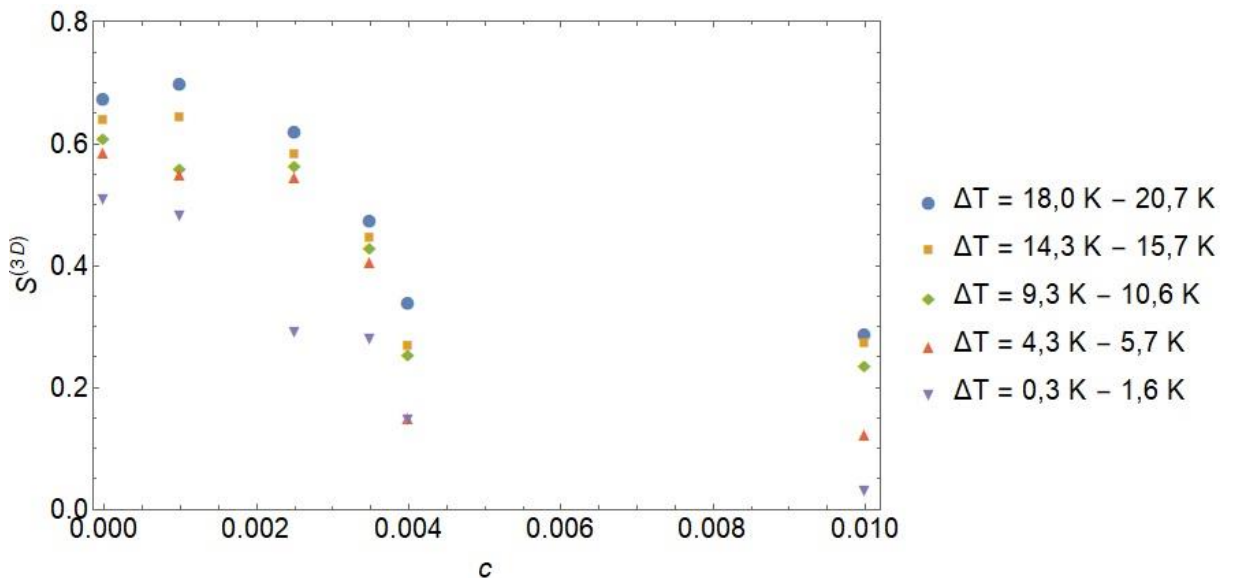
Tabela 6: Temperaturna odvisnost orientacijskega ureditvenega parametra $S^{(3D)}$ za mešanico TK in ND s koncentracijo $c_5 = 0,01$ [14].

Osredotočimo se na vrednost orientacijskega ureditvenega parametra nematičnega TK v odvisnosti od koncentracije sferičnih ND. Iz zgornjih tabel vidimo, da vse točke meritev padejo v določen temperaturni interval (slika 6). Predpostavili bomo, da je meritev orientacijskega ureditvenega parametra potekala znotraj določenega temperaturnega intervala, kjer se je nato spreminjala koncentracija ND. Na tak način lahko prikažemo odvisnost orientacijskega ureditvenega parametra od koncentracije ND znotraj določenega temperaturnega intervala (slika 7). Pri nizkih koncentracijah ND, do $c = 0,001$, odvisnost $S^{(3D)}$ od c ne vodi do kakršnihkoli večjih sprememb ureditvenega parametra $S^{(3D)}$. Pri $c = 0,0025$ in $c = 0,0035$ se prične vrednost $S^{(3D)}$ zmanjševati. Pri $c = 0,004$ opazimo močen padeč vrednosti $S^{(3D)}$, medtem ko do $c = 0,01$ ne opazimo več bistvenih sprememb ureditvenega parametra $S^{(3D)}$. Očitno pri dovolj majhnih koncentracijah, ND ne uničujejo orientacijskega ureditvenega reda, medtem ko nad določeno kritično koncentracijo prisotnost ND močno vpliva na orientacijski ureditveni red, ki vodi do strukturnega prehoda iz nematične v paranematično fazo (motena nematična faza z majhnim ureditvenim parametrom). Naš cilj je sedaj replicirati to obnašanje z matematičnim modelom, kjer nad določeno kritično jakost naključnega polja D , ki jo asociiramo z vplivom ND na TK

matriko, pride do velike spremembe orientacijskega ureditvenega parametra η , nakar sledi stabilizacija okoli neke končne vrednosti.



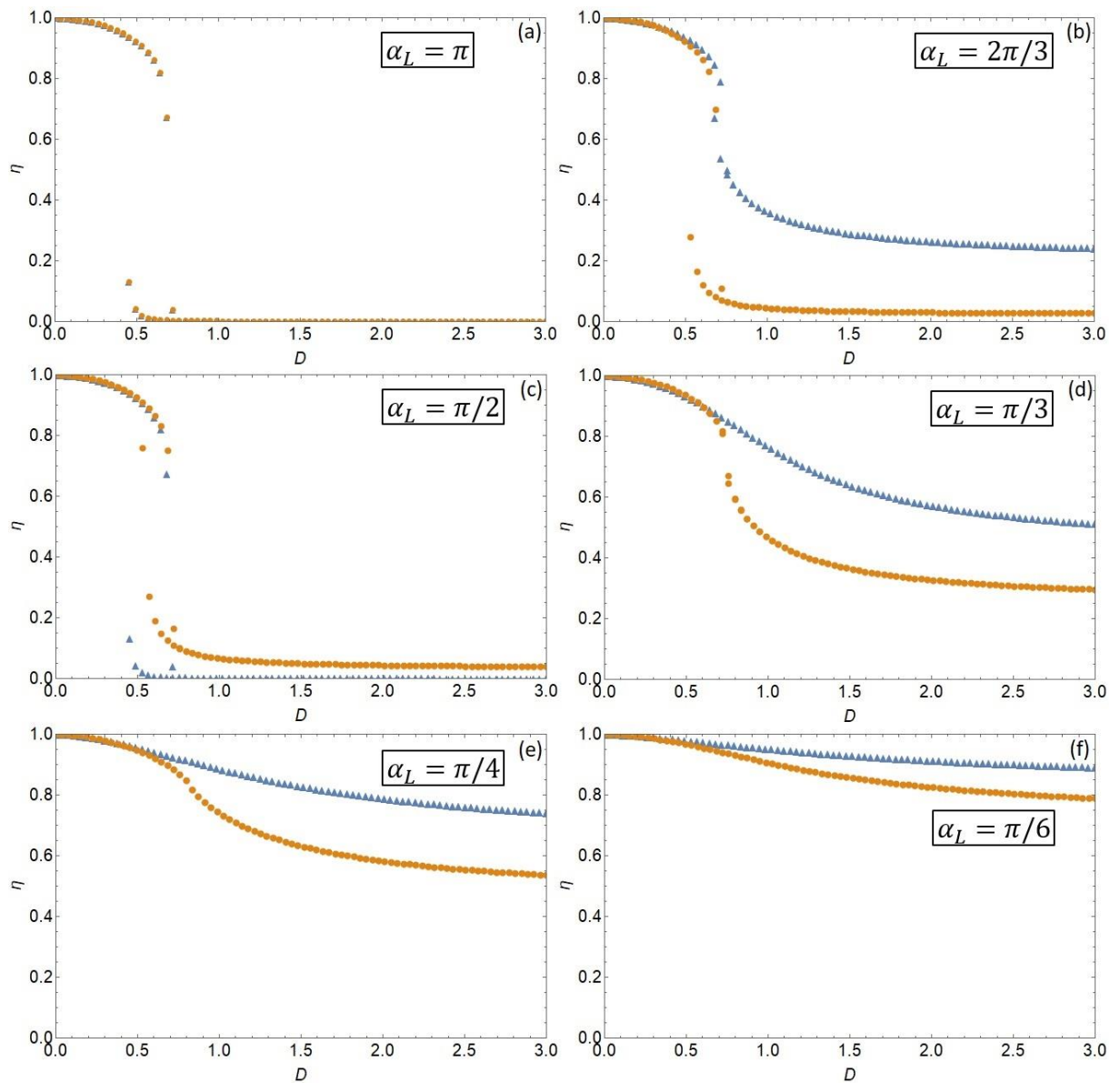
Slika 6: Diagram temperaturene odvisnosti orientacijskega ureditvenega parametra $S^{(3D)}$ za različne koncentracije ND c . Obarvani stolpci prikazujejo temperaturne intervale znotraj katerih so bile opravljene meritve.



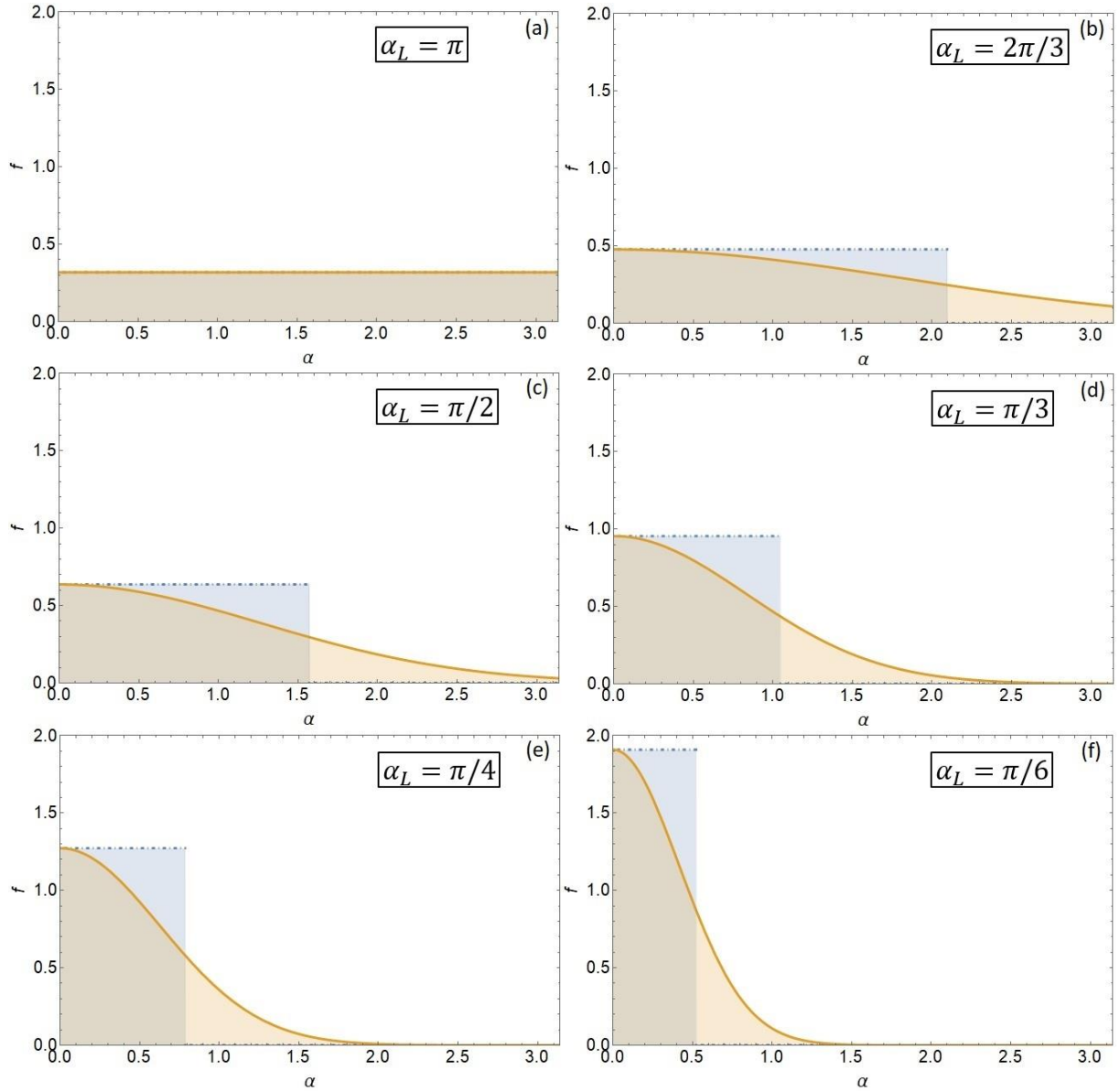
Slika 7: Diagram orientacijskega ureditvenega parametra $S^{(3D)}$ v odvisnosti od koncentracije ND c za različne temperaturne intervale.

4.2 NUMERICNE SIMULACIJE

V tem delu predstavimo rezultate matematičnega modela. Numerično bomo preučevali enačbe (49) za različne vrednosti kontrolnih parametrov. Strukturo sistema določa kompromis med notranjim poljem, zunanjim poljem in naključnim poljem. V našem modelu obravnavamo stanje pri temperaturi $T = 0$, kjer fiksiramo vrednosti notranjega in zunanjega polja, ter se fokusiramo zgolj na vpliv naključnega polja. V simulacijah jakost naključnega polja spreminjamo od $D = 0$ do $D = D_{max}$ in od $D = D_{max}$ do $D = 0$. Na takšen način določimo histerezno obnašanje struktur [27]. Za notranje polje uporabimo vrednost $Jz = 1$, za zunanje polje $H = 0,001$ in za maksimalno jakost naključnega polja postavimo $D_{max} = 3$. Enačbo (49) rešujemo iterativno na sledeč način. Za začetno vrednost vzamemo $\eta_{star} = 1$. Preko integrala izračunamo novo vrednost η_{nov} , ki jo nato vstavimo nazaj v integral kot η_{star} in ponovno izračunamo η_{nov} . Ta postopek ponavljamo tako dolgo, dokler absolutna razlika med vrednostjo prejšnje iteracije η_{star} in vrednostjo nove iteracije η_{nov} ni manjša od želene natančnosti ε . Mi bomo uporabili natančnost $\varepsilon = 0,00001$. Spreminjali bomo tudi vrednosti parametrov za porazdelitveni funkciji $f_{Izo}(\alpha)$ in $f_{Gauss}(\alpha)$. Pri izotropni porazdelitveni funkciji (50) je edini parameter limitni kot α_L . Zanj bomo uporabili vrednosti π , $2\pi/3$, $\pi/2$, $\pi/3$, $\pi/4$ in $\pi/6$. Pri Gaussovi porazdelitveni funkciji (51) vzamemo za povprečno vrednost $\mu = 0$, normalizacijsko konstanto C in varianco σ pa si izberemo na tak način, da bosta vrednosti $f_{Izo}(\alpha)$ in $f_{Gauss}(\alpha)$ pri $\alpha = 0$ za določen α_L enaki.



Slika 8: Diagrami prikazujejo ureditveni parameter η v odvisnosti od jakosti naključnega polja D za izotropno porazdelitveno funkcijo $f_{Izo}(\alpha)$ (modri trikotniki) in Gaussovo porazdelitveno funkcijo $f_{Gauss}(\alpha)$ (rjave točke). Vrednosti limitnih kotov so a) $\alpha_L = \pi$, b) $\alpha_L = 2\pi/3$, c) $\alpha_L = \pi/2$, d) $\alpha_L = \pi/3$, e) $\alpha_L = \pi/4$ in f) $\alpha_L = \pi/6$.

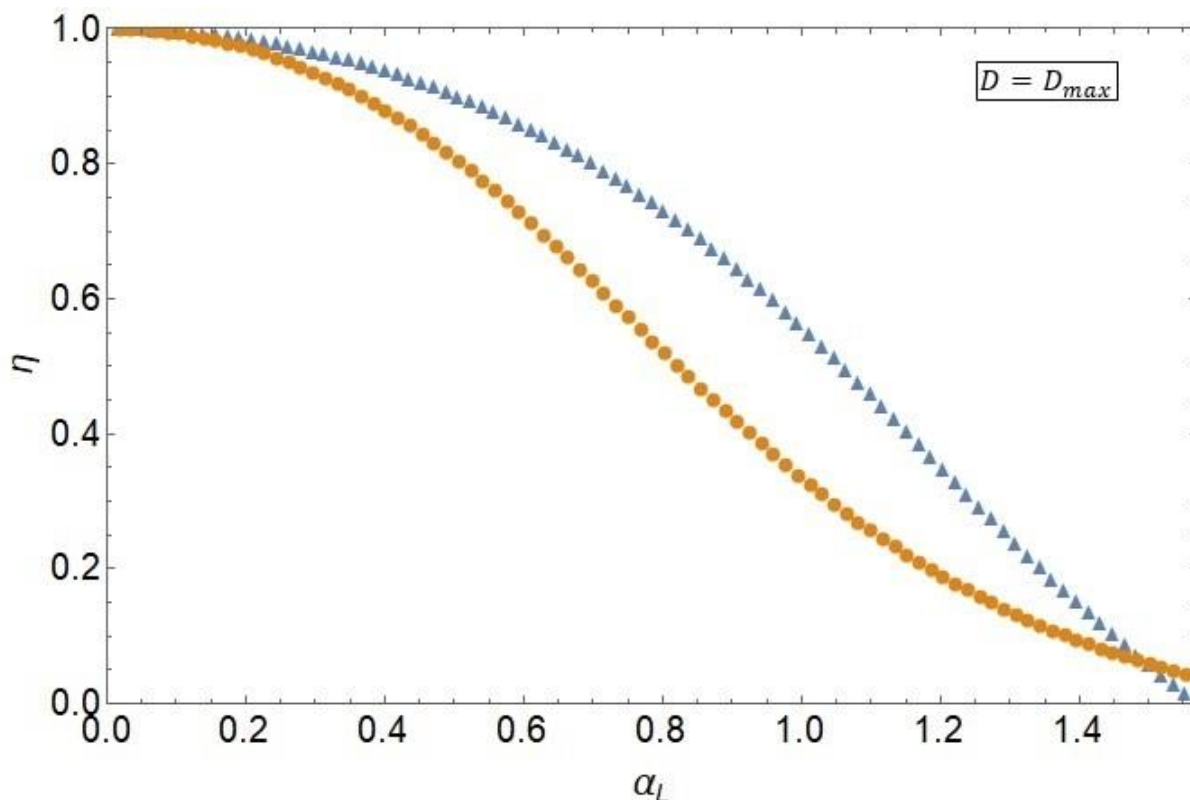


Slika 9: Diagrami prikazujejo izotropno porazdelitveno funkcijo $f_{Izo}(\alpha)$ (modri diagram) in Gaussovo porazdelitveno funkcijo $f_{Gauss}(\alpha)$ (rjavi diagram) pri vrednosti limitnih kotov a) $\alpha_L = \pi$, b) $\alpha_L = 2\pi/3$, c) $\alpha_L = \pi/2$, d) $\alpha_L = \pi/3$, e) $\alpha_L = \pi/4$ in f) $\alpha_L = \pi/6$.

Pri sliki 8 kot prvo opazimo, da je pri vseh diagramih vrednost $\eta = 1$ pri $D = 0$. Pri eksperimentalnih meritvah zasledimo $S^{(3D)} \approx 0,6$ pri $c = 0$. To odstopanje lahko razložimo na dva načina. Eksperimentalne meritve so bile izveden pri temperaturah v okolici temperature faznega prehoda $T_{NI} = 358,9$ K. Posledično prihaja do termičnih fluktuacij molekul, ki zmanjšujejo povprečno urejenost sistema. Naš model predpostavlja, da se sistem nahaja pri temperaturi $T = 0$ K. S tem zanemarimo kakršnekoli termične fluktuacije molekul, ki bi vplivale na ureditveni parameter. Hkrati pa moramo upoštevati, da naš model

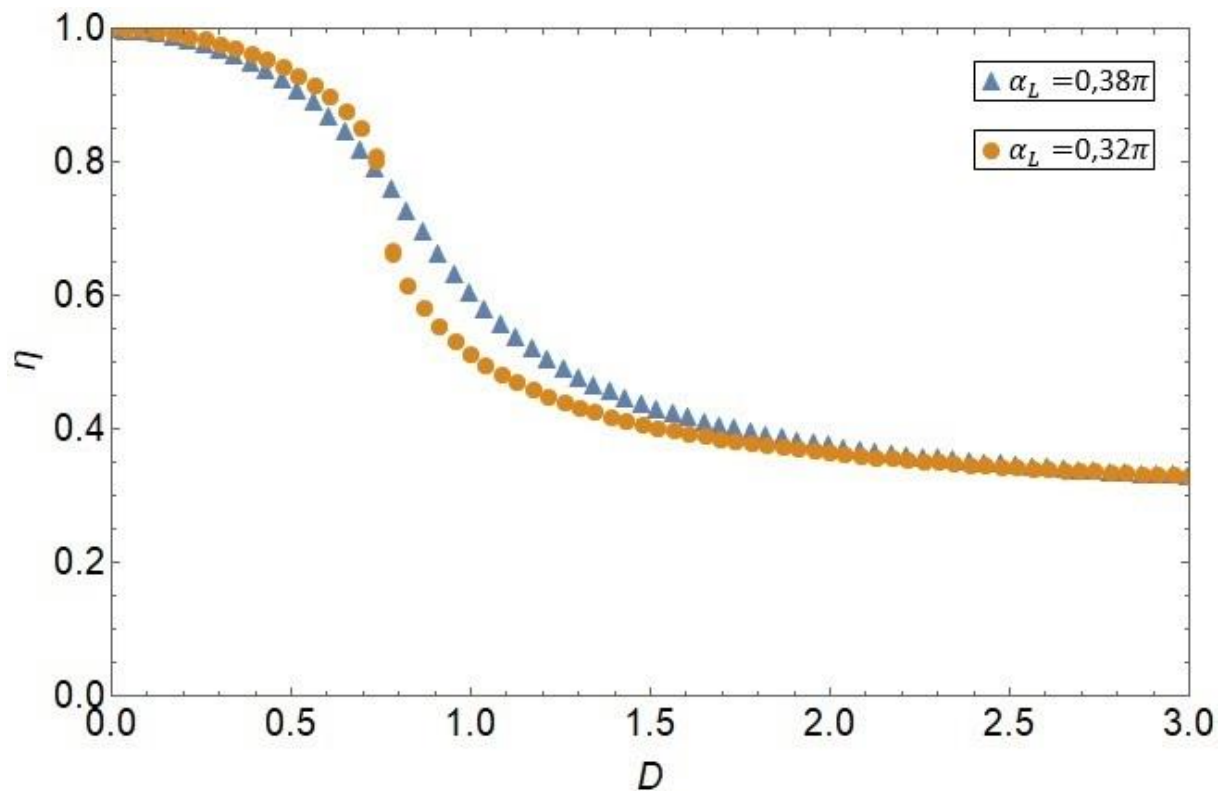
opisuje 2-dimenzionalni sistem za razliko od eksperimenta, ki je 3-dimenzionalni sistem. Predstavljajmo si, da v 3-dimenzionalnem sistemu opišemo orientacijo molekul z polarnim in azimutnim kotom θ in ϕ . Predpostavimo da sta dve sosednji molekuli med seboj vzporedni, kar pomeni da imata enak θ in ϕ . Sedaj projiciramo ti dve molekuli na xy -ravnino. Pričakovano bi opazili, da sta projekciji molekul vzporedni. V tem primeru imamo v 2-dimenzionalnem kot v 3-dimenzionalnem sistemu maksimalno ureditev. Sedaj pa predpostavimo, da imata molekuli enak θ , ne pa tudi ϕ . Molekuli med seboj nista več vzporedni, medtem ko pa projekciji molekul na xy -ravnini še vedno sta. V tem primeru pa ima 2-dimenzionalni sistem maksimalno ureditev, 3-dimenzionalni sistem pa ne. Potemtakem dve sosednji molekuli, ki sta vzporedni v 2-dimenzionalnem sistemu, nista nujno tudi vzporedni v 3-dimenzionalnem sistemu. Posledično ima 2-dimenzionalni sistem višjo stopnjo ureditve, saj ima manj prostostnih stopenj, ki bi lahko povzročali zmanjšanje stopnje ureditve. V našem konkretnem primeru to pomeni, da pri eksperimentu dodatna prostostna stopnja lahko vodi do manjše stopnje ureditve.

Z naraščajočim D pada vrednost η , ker večja vrednost D vsiljuje močnejšo stopnjo nereda. Pade vrednosti η je odvisen od vrste porazdelitvene funkcije in limitnega kota. V primeru, kjer so vse orientacije molekul med kotoma 0 in π enakovredne za obe porazdelitveni funkciji, pade vrednost η na nič pri $D \approx 0,6$ (slika 8a). Vrednost $\eta = 0$ predstavlja popolno neurejeno stanje, kar pa ne opazimo pri eksperimentalnih meritvah ko povečujemo c . Iz tega lahko sklepamo, da niso vse orientacije molekul med kotoma 0 in π enakovredne. Pri vseh ostalih diagramih, kjer nimamo te enakovrednosti orientacij, pa z večanjem D pade η na neko končno vrednost. Izjemo vidimo zgolj v sliki 8c za izotropno porazdelitev pri $\alpha_L = \pi/2$. Z manjšanjem α_L povečujemo končno vrednost η za obe porazdelitveni funkciji, le da je pri Gaussovi porazdelitveni funkciji ta kočna vrednost nekoliko manjša kot pri izotropni porazdelitveni funkciji (slika 10).



Slika 10: Diagram prikazuje vrednost ureditvenega parametra η v odvisnosti od limitnega kota α_L z vrednostjo med 0 in $\pi/2$ pri jakosti naključnega polja $D = D_{max}$. Z modrimi trikotniki označimo vrednosti za izotropno porazdelitev in z rjavimi točkami obarvamo vrednosti za Gaussovo porazdelitev.

S pomočjo slike 10 lahko sedaj poskusimo oceniti vrednost α_L in vrsto porazdelitvene funkcije, ki bi ustrezno opisovala rezultate eksperimenta. Povprečna vrednost $S^{(3D)}$ pri visoki vrednosti c znaša 0,189. Kot smo že omenili, ima 3-dimenzionalni sistem zaradi več prostostnih stopenj, manjšo stopnjo ureditve kot 2-dimenzionalni sistem. Predpostavili bomo, da je v našem modelu vrednost η za 60% večja od vrednosti $S^{(3D)}$. Izbira 60% izhaja iz tega, da je razmerje med povprečno vrednostjo $S^{(3D)}$ pri $c = 0$ in η pri $D = 0$ približno 0,6. V tem primeru je $\eta = 0,315$, ki ustreza vrednosti $0,38\pi$ (69°) za izotropno porazdelitev in $0,32\pi$ (57°) za Gaussovo porazdelitev. Izrišimo še diagram η v odvisnosti od D , kjer uporabimo zgornji vrednosti $\alpha_L = 0,38\pi$ pri izotropni porazdelitveni funkciji in $\alpha_L = 0,32\pi$ pri Gaussovi porazdelitveni funkciji (slika 11).



Slika 11: Diagram prikazuje vrednost ureditvenega parametra η v odvisnosti od jakosti naključnega polja D za izotropno porazdelitveno funkcijo f_{izo} pri limitnem kotu $\alpha_L = 0,38\pi$ in za Gaussovo porazdelitveno funkcijo f_{Gauss} pri limitnem kotu $\alpha_L = 0,32\pi$. Z modrimi trikotniki obarvamo vrednosti za izotropno porazdelitev in z rjavimi točkami obarvamo vrednosti za Gaussovo porazdelitev.

Primerjati želimo obliko diagramov v sliki 11 z obliko diagrama v sliki 7. V sliki 7 pri dovolj majhnih vrednostih c nimamo bistvenih sprememb pri vrednosti $S^{(3D)}$. Enako imamo v sliki 11, kjer pri dovolj majhnih vrednostih D nimamo bistvenih sprememb pri vrednosti η . Prav tako pri dovolj velikih vrednostih c kot D , se vrednosti $S^{(3D)}$ in η ne spreminjata več. Med vrednostmi $c = 0,0025$ in $c = 0,004$ pa imamo hiter padec vrednosti $S^{(3D)}$. Pri modelu z f_{Gauss} imamo velik padec vrednosti η iz $\eta = 0,960$ na $\eta = 0,452$ v območju med $D = 0,4$ in $D = 1,2$. Relativna sprememba v tem območju je 52,9%. V enakem območju pa se pri modelu z f_{iso} vrednost η spremeni iz $\eta = 0,949$ na $\eta = 0,547$, kar predstavlja 42,3% relativno spremembo. Se pravi, da je pri modelu z f_{iso} sprememba vrednosti η manjša. Podobne odzive opazimo tudi pri slikah 8d, 8e in 8f. Na podlagi tega sklepamo, da je f_{Gauss} primernejša oblika porazdelitvene funkcije za modeliranje sistema nematičnega TK ob prisotnosti ND.

5 ZAKLJUČEK

V magistrskem delu smo izdelali minimalni matematični model, ki kvantitativno in kvalitativno opisuje spremembo orientacijskega ureditvenega parametra TK v prisotnosti ND, ki vsiljujejo naključno urejenost. Izdelali smo dvodimenzionalni mrežni model naključnega anizotropnega nematika v odvisnosti od ureditvenega parametra pri temperaturi absolutne ničle. Za modeliranje eksperimentalnih rezultatov pri relativno majhnih koncentracijah ND smo uporabili približek povprečnega polja. V analizi smo upoštevali dve različni porazdelitvi orientacij naključnega polja po prostoru, namreč izotropno in Gaussovo porazdelitev. Modelirali smo rezultate eksperimentalnih meritev, ki jo je izvedla ekipe pod vodstvom I. Lelidisa [14].

Iz eksperimentalnih meritev smo razbrali, da pri nizkih koncentracijah ND, do $c = 0,001$, odvisnost ureditvenega parametra $S^{(3D)}$ od c ne izkazuje večjih sprememb ureditve. Pri $c = 0,0025$ in $c = 0,0035$ se prične vrednost $S^{(3D)}$ opazno zmanjševati in se nato relativno šibko spreminja do koncentracije $c = 0,01$. Rezultati naznanjajo, da pri dovolj majhnih koncentracijah ND šibko motijo orientacijsko ureditev. Nad določeno kritično koncentracijo prisotnost ND znatno vplivajo na orientacijsko ureditev, kar nakazuje strukturni prehod iz nematične v delno neurejeno fazo, ki spominja na paranematično ureditev.

Dvodimenzionalni mrežni model naključnega anizotropnega nematika smo obravnavali numerično za različne vrednosti kontrolnih parametrov. Fokusirali smo se zgolj na vpliv naključnega polja, kjer smo ciklično spreminjali vrednost jakosti naključnega polja od $D = 0$ do $D = D_{max}$ in od $D = D_{max}$ do $D = 0$. Z omenjenim ciklom smo lahko določili področje histereznega obnašanja. Spreminjali smo tudi vrednosti parametrov za porazdelitveni funkciji $f_{Izo}(\alpha)$ in $f_{Gauss}(\alpha)$. Pri $f_{Izo}(\alpha)$ je edini parameter limitni kot α_L . Zanj smo uporabili vrednosti π , $2\pi/3$, $\pi/2$, $\pi/3$, $\pi/4$ in $\pi/6$. Pri $f_{Gauss}(\alpha)$ pa smo vzeli za povprečno vrednost $\mu = 0$, normalizacijsko konstanto C in varianco σ pa smo si izbrali na tak način, da sta vrednosti $f_{Izo}(\alpha)$ in $f_{Gauss}(\alpha)$ pri $\alpha = 0$ za določen α_L bili enaki.

Rezultati matematičnega modela prikazujejo kvalitativno podobne spremembe ureditvenega parametra η v primerjavi z eksperimentalnimi meritvami. Pri majhnih vrednostih naključnega polja D zasledimo majhne spremembe η . Sledi padec vrednosti η v določenem območju D . Pri velikih vrednostih D pa se vrednost η stabilizira. Padec

vrednosti η je odvisen od vrednosti α_L , kjer manjša vrednost α_L povzroči manjšo spremembo η in od vrste porazdelitvene funkcije, kjer je padec vrednosti η manjši pri $f_{Izo}(\alpha)$ in večji pri $f_{Gauss}(\alpha)$.

Pri kvantitativni obravnavi smo naleteli na odstopanja med eksperimentalnimi meritvami in rezultati matematičnega modela. To lahko pripišemo zanemarjenju termičnih fluktuacij v matematičnem modelu in dejstvu, da naš matematični model opisuje 2-dimenzionalni sistem za razliko od eksperimenta, ki je 3-dimenzionalni sistem. Dodatna prostostna stopnja pri eksperimentu lahko vodi do manjše stopnje ureditve.

Za ugotovitev primernosti izbire $f_{Izo}(\alpha)$ ali $f_{Gauss}(\alpha)$ v matematičnem modelu, smo primerjali vrednosti $S^{(3D)}$ in η pri vrednostih $c = 0$ in $D = 0$. Razmerje med obema vrednostma je približno 0,6. Predpostavili smo, da to razmerje velja tudi za vrednosti $S^{(3D)}$ in η pri velikih vrednostih c in D . S pomočjo eksperimentalnih meritev za $S^{(3D)}$ smo lahko ocenili vrednost η . Nato smo določili vrednost limitnega kota za $f_{Izo}(\alpha)$ ali $f_{Gauss}(\alpha)$. Vrednosti sta $0,38\pi$ (69°) za $f_{Izo}(\alpha)$ in $0,32\pi$ (57°) za $f_{Gauss}(\alpha)$. Ponovno smo izrisali oba diagrama, kjer smo njuno obnašanje primerjali z eksperimentalnimi meritvami. Ugotovili smo, da se oba diagrama obnašata podobno pri majhnih in velikih vrednostih D . Razlika nastopi v območju med $D = 0,4$ in $D = 1,2$, kjer je relativna sprememba η v tem območju 52,9% za $f_{Gauss}(\alpha)$ in 42,3% za $f_{Izo}(\alpha)$. Na podlagi tega smo sklepali, da je $f_{Gauss}(\alpha)$ veliko bolj primernejša izbira porazdelitvene funkcije za modeliranje sistema nematičnega TK ob prisotnosti ND.

Kljub številnim predpostavkam se minimalni matematični model kvalitativno dobro ujema z rezultati eksperimentalnih meritev. Kvantitativno neujemanje lahko razložimo z zanemarjanjem termičnih fluktuacij in z neenakostjo dimenzije prostora v modelu in eksperimentu. Smiselno nadaljevanje obravnave takšnih sistemov je nadgradnja matematičnega modela za 3-dimenzionalne sisteme in vključitev termičnih fluktuacij.

6 LITERATURA

- [1] P.G. de Gennes in J. Prost, *The Physics of Liquid Crystals* (Clarendon Press, Oxford, 1993).
- [2] S. Singh, *Liquid Crystals Fundamentals* (World Scientific, Singapore, 2002).
- [3] L. M. Blinov, *Structure and Properties of Liquid Crystals*, (Springer, 2011).
- [4] P. Poulin, H. Stark, T. C. Lubensky in D. A. Weitz, *Novel Colloidal Interactions in Anisotropic Fluids*, *Science*, **275** (5307), 1770-1773 (1997).
- [5] D. Pires, J. B. Fleury in Yves Galerne, *Colloid Particles in the Interaction Field of a Disclination Line in a Nematic Phase*, *Physical Review Letters*, **98**, 247801 (2007).
- [6] D. Coursault, J. Grand, B. Zappone, H. Ayeb, G. Levi, N. Felidj in E. Lacaze, *Linear self-assembly of nanoparticles within liquid crystal defect arrays*, *Advanced Materials*, **24**, 1461 (2012).
- [7] M. Lavrič, V. Tzitzios, S. Kralj, G. Cordoyiannis, I. Lelidis, G. Nounesis, V. Georgakilas, H. Amenitsch, A. Zidanšek in Z. Kutnjak, *The effect of graphene on liquid-crystalline blue phases*, *Applied Physics Letters*, **103**, 143116 (2013).
- [8] L. M. Lopatina in J. Selinger, *Theory of Ferroelectric Nanoparticles in Nematic Liquid Crystals*, *Physics Review Letters*, **102**, 197802 (2009).
- [9] R. Repnik, V. Popa-Nita in S. Kralj, *Mixture of Nanoparticles and Liquid Crystal Phases exhibiting Topological Defects*, *Molecular Crystals and Liquid Crystals*, **560**, 115-122 (2012).
- [10] S. Kaur, S. P. Singh, A. M. Biradar, A. Choudhary in K. Sreenivas, *Enhanced electro-optical properties in gold nanoparticles doped ferroelectric liquid crystals*, *Applied Physics Letters*, **91**, 023120 (2007).

- [11] Y. Shiraishi, N. Toshima, K. Maeda, H. Yoshikawa, J. Xu in S. Kobayashi, *Frequency modulation response of a liquid-crystal electro-optical device doped with nanoparticles*, Applied Physics Letters, **81**, 2845 (2002).
- [12] A. Thanassoulas, E. Karatairi, G. Cordoyiannis, Z. Kutnjak, V. Tzitzios, I. Lelidis in G. Nounesis, *CdSe nanoparticles dispersed in ferroelectric smectic liquid crystals: Effect upon the smectic order and the smectic-A to chiral smectic-C phase transition*, Physical Review E **88**, 032504 (2013).
- [13] G. M. Koenig, J. de Pablo in N. L. Abbott, *Characterization of the Reversible Interaction of Pairs of Nanoparticles Dispersed in Nematic Liquid Crystals*, Langmuir, **25** (23), 13318-13321 (2009).
- [14] C. Kyrou, S. Kralj, M. Panagopoulou, Y. Raptis, G. Nounesis in I. Lelidis, *Impact of spherical nanoparticles on nematic order parameters*, Physical Review E **97**, 042701 (2018).
- [15] T. Bellini, L. Radzihovsky, J. Toner in N. A. Clark, *Universality and Scaling in the Disordering of a Smectic Liquid Crystal*, Science, **294** (5544), 1074-1079 (2001).
- [16] M. V. Kurik in O. D. Lavretanovich, *Defects in liquid crystals: homotopy theory and experimental studies*, Soviet Physics Uspekhi, **31** (3), 196-224 (1988).
- [17] D. E. Feldman, *Quasi-long-range order in nematics confined in random porous media*, Physical Review Letters, **84**, 4886 (2000).
- [18] B. Zhou, G. S. Iannacchione, C. W. Garland in T. Bellini, *Random-field effects on the nematic-smectic-A phase transition due to silica aerosil particles*, Physical Review E **55**, 2962 (1997).
- [19] T. Bellini, M. Buscaglia, C. Chiccoli, F. Mantegazza, P. Pasini in C. Zannoni, *Nematics with Quenched Disorder: What Is Left when Long Range Order Is Disrupted?*, Physical Review Letters, **85**, 1008 (2000).
- [20] Y. Imry in S. K. Ma, *Random-Field Instability of the Ordered State of Continuous Symmetry*, Physical Review Letters, **35**, 1399 (1975).

- [21] M. Kleman in O. D. Lavrentovich, *Soft Matter Physics: An Introduction* (Springer, New York, 2003).
- [22] P. Poulin in D. A. Weitz, *Inverted and multiple nematic emulsions*, *Physical Review E* **57**, 626 (1998).
- [23] T. Jin in D. Finotello, *Aerosil Dispersed in a Liquid Crystal: Magnetic Order and Random Silica Disorder*, *Physical Review Letters*, **86**, 818 (2001).
- [24] D. J. Cleaver, S. Kralj, T. J. Sluckin in M. P. Allen, *Liquid Crystals in Complex Geometries Formed by Polymer and Porous Networks* (Taylor and Francis, London, 1996).
- [25] R. Harris, M. Plischke in M. J. Zuckermann, *New Model for Amorphous Magnetism*, *Physical Review Letters*, **31**, 160 (1973).
- [26] P. A. Lebwohl in G. Lasher, *Nematic-Liquid-Crystal Order-A Monte Carlo Calculation*, *Physical Review A* **6**, 426 (1972).
- [27] S. Buček, S. Kralj in T. J. Sluckin, *Hysteresis in Two-Dimensional Liquid Crystal Models*, *Advances in Condensed Matter Physics*, **2015**, 834867 (2015).