



Univerza v Mariboru

---

Fakulteta za naravoslovje  
in matematiko

# **VPLIV NANODELCEV NA STRUKTURO ZVITE DISLOKACIJE V SMEKTIČNI A FAZI**

Diplomski seminar na bolonjskem študijskem programu 1. stopnje Fizika

Dejvid Črešnar

Mentor: red. prof. dr. Samo Kralj

Maribor, 2013

ČREŠNAR, D.: Vpliv nanodelcev na strukturo zvite dislokacije v smektični A fazi, diplomski seminar, Univerza v Mariboru, Fakulteta za naravoslovje in matematiko, Oddelek za fiziko, 2013.

## POVZETEK

V seminarju obravnavamo vpliv nanodelcev na strukturo zvutih dislokacij v smektični A fazi tekočih kristalov. Za opis sistema uvedemo ureditveni parameter, ki ga uporabimo v Landau – de Gennesovem fenomenološkem modelu. Minimizacija proste energije vodi do Euler – Lagrangevih enačb, ki jo rešujemo numerično z Eulerjevo metodo. Z nanodelci induciramo različne robne pogoje znotraj jedra dislokacije. Preučili smo, kako različno površinsko obdelani nanodelci vplivajo na strukturne lastnosti dislokacije.

Ključne besede: smektična A faza, zvita dislokacija, smektični translacijski ureditveni parameter, Landau – de Gennesov fenomenološki model, gostota proste energije, Euler – Lagrangove enačbe, Eulerjeva metoda, robni pogoji inducirani z nanodelci.

## ABSTRACT

In the seminar we study how nanoparticles effect the screw dislocation structure in smectic A phase of liquid crystals. To describe the system we introduce an order parameter, the which we use in the Landau – de Gennes phenomenological model. We insert the free energy density of the system into the Euler – Lagrange equation, which we solve numerically with the Euler method. Nanoparticles induce different boundary conditions inside the dislocation core. We compare simulation results of the system with and without nanoparticles.

Key words: smectic A phase, screw dislocation, smectic translational order parameter, Landau – de Gennes phenomenological model, free energy density, Euler – Lagrange equations, Euler method, nanoparticle induced boundary conditions.

# KAZALO

<b>1 UVOD .....</b>	<b>1</b>
<b>2 SMEKTIČNA FAZA TEKOČIH KRISTALOV .....</b>	<b>2</b>
2.1 SMEKTIČNA A FAZA.....	3
2.2 ZVITE DISLOKACIJE V SMEKTIČNI A FAZI.....	4
<b>3 FENOMENOLOŠKI MODEL.....</b>	<b>6</b>
3.1 UREDITVENI PARAMETER.....	6
3.2 PROSTA ENERGIJA.....	7
3.3 EULER-LAGRANGEOVE ENAČBE.....	11
3.4 NUMERIČNO RAČUNANJE .....	13
<b>4 VPLIV NANODELCEV NA ZVITE DISLOKACIJE .....</b>	<b>15</b>
<b>5 ZAKLJUČEK .....</b>	<b>19</b>

# 1 UVOD

V času šolanja nas učijo, da prepoznamo tri faze snovi. To so trdna (kristalna) faza, kapljična (izotropna) faza in plinska faza. Naše vsakodnevne izkušnje podpirajo takšno kategorizacijo snovi. Primerjave med trdninami in tekočinami so pokazale, da ti dve fazi prikazujeta različne optične lastnosti. Nekatere organske spojine pa pri prehodu med kristalno in izotropno fazo pri določenih temperaturah pokažejo optične lastnosti, ki ne spadajo v kategorijo optičnih lastnosti že znanih faz snovi. Obravnavanja so pokazala, da določene organske spojine tvorijo prehodne faze, ki predstavljajo novo termodinamsko stanje snovi, ki se razlikuje od izotropnih tekočin. Takšne faze snovi imenujemo tekočokristalne faze [1].

Za tekočokristalne faze so značilni različni ureditveni redi, kot sta orientacijski red in translacijski red, ki določujejo posamezne tekočokristalne faze. Orientacijski red je značilen za nematično fazo, kombinacija orientacijskega reda in translacijskega reda pa je značilna za smektično fazo.

Ena izmed zanimivejših lastnosti tekočih kristalov je široka paleta optičnih vzorcev, ki jih prikazujejo v tekočokristalni fazi. Ti vzorci so pogosto posledica strukturnih defektov, ki nastanejo znotraj tekočih kristalov. Zgodovinsko gledano, so znanstveniki odkrili strukturo nematikov in smektikov preko defektov, ki karakterizirajo ti dve fazi. Slednji so zlahka vidni z optičnim mikroskopom [2].

Znanstveniki so z boljšim razumevanjem strukturnih defektov začeli dojemati njihovo vlogo pri statistični termodinamiki faznih prehodov. To je še posebej veljalo za fazni prehod med nematično in smektično A fazo v sistemih brez zrcalne simetrije [2]. Pri tem faznem prehodu se pri ustreznih pogojih lahko tvori vmesna mezofaza, za katero so značilne zvite dislokacije. Nastanek te mezofaze lahko razumemo kot nek kompromis med nasprotujočimi si urejevalnimi težnjami nematične faze, ki se nahaja pri višjih temperaturah, in smektično A faze, ki se nahaja pri nižjih temperaturah.

Raziskave vpliva nanodelcev na defekte v tekočih kristalih so izjemno aktualne [3]. Izkazalo se je, da je možno termodinamsko stabilizirati mezofaze z interakcijo nanodelcev z dislokacijami, preko univerzalnega mehanizma ADCT (angleško: **A**daptive **D**efect **C**ore **T**argeting) [3].

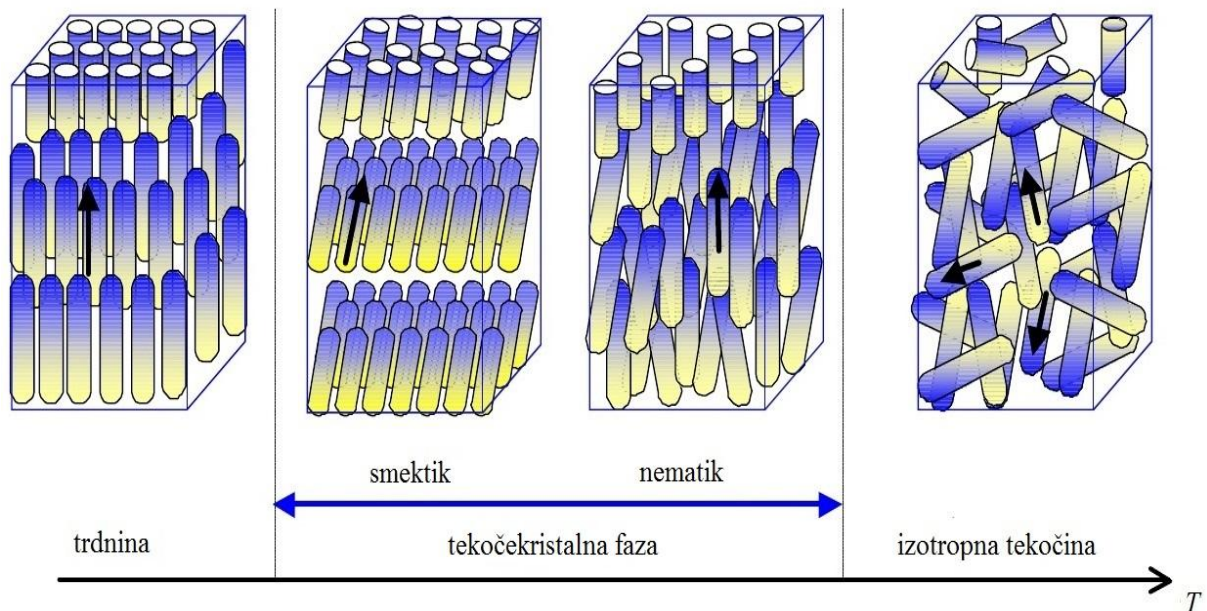
V diplomskem seminarju bomo obravnavali vpliv nanodelcev na strukturo zvite dislokacije v smektični A fazi. V 1. poglavju si bomo ogledali lastnosti smektične A faze in pod kakšnimi pogoji nastanejo zvite dislokacije v smektični A fazi. V 2. poglavju se bomo lotili matematičnega opisa smektične A faze, ki vsebuje zvite dislokacije. Najprej bomo uvedli ureditveni parameter, s katerim bomo lahko določili, v kateri fazi se nahaja opazovan sistem. Ta ureditveni parameter bomo uporabili v Landau – de Gennesovem fenomenološkem modelu, ki je termodinamski opis faznega prehoda. Izrazili bomo termodinamski potencial, prosto energijo sistema, v katerem bomo upoštevali različne vplive na energijo sistema. Ker ima vsak fizikalni sistem težnjo po minimalni energiji, bomo uporabili Euler – Lagrangeve enačbe za določitev vrednosti spremenljivk, s katerimi bomo izrazili strukturo dislokacije. Z nanodelci lahko reguliramo različne robne pogoje znotraj jedra dislokacije. V 3. poglavju si

bomo ogledali tri različne robne pogoje, ki jih tvorimo z nanodelci, ter kakšen je njihov vpliv na strukturo jedra zvite dislokacije.

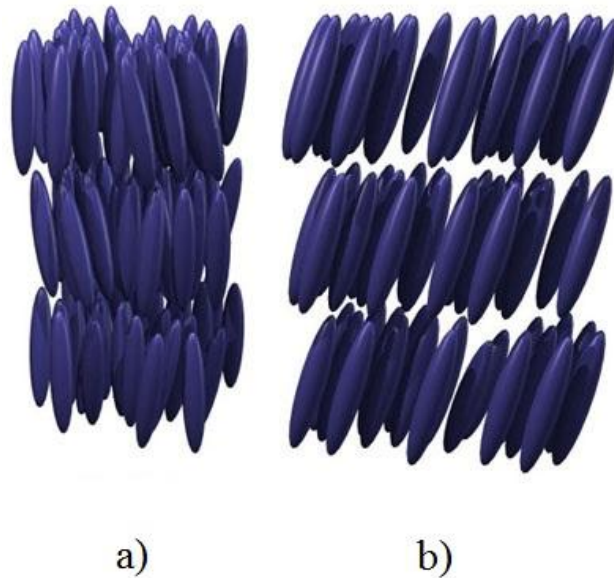
## 2 SMEKTIČNA FAZA TEKOČIH KRISTALOV

Kadar razmišljamo o stanjih kondenzirane snovi, običajno pomislimo na dva ekstrema. Eden so kristalne trdnine, kjer atomi tvorijo popolno periodično strukturo, ki sega v neskončnost v tri smeri. Drugi ekstrem so tekočine in steklo, kjer so atomi ali molekule popolnoma neurejeni in je celotni sistem orientacijsko in pozicijsko izotropen. Takšen sistem je enak, ne glede na smer, iz katere sistem opazujemo [4].

Mnogo desetletij so znanstveniki vedeli, da je možno dodatno stanje snovi. V tem dodatnem stanju so težišča molekul naključno porazdeljena kot v tekočini ali steklu, toda sistem je v celoti orientacijsko anizotropen na makroskopski ravni kot kristalne trdnine (slika 1). Posledica je, da so nekatere lastnosti tekočin različne v različnih smereh [4]. Tekočekristalne faze ločujemo glede na simetrijske lastnosti. Na sliki 1 imamo prikazani nematično in smektično fazo. Za nematično fazo je značilen orientacijski red, kjer so dolge osi molekul v povprečju usmerjene v isto smer. Za smektično fazo pa sta značilna orientacijski in translacijski red. V smektični fazi so molekule urejene v plasti, znotraj katerih se lahko prosto gibajo, dolge osi molekul pa so v povprečju usmerjene v isto smer. Različne kombinacije orientacijskega in translacijskega reda tvorijo različne vrste smektičnih faz, kot sta npr. smektična A faza in smektična C faza (slika 2).



Slika 1. Različne faze tekočega kristala. Z višanjem temperature ( $T$ ) preidemo iz trdninske faze v tekočekristalno fazo in nato v izotropno fazo. Znotraj temperaturnega območja tekoče kristalne faze je lahko več različnih faz, kot so npr. smektiki in nematiki. S puščico označujemo lokalno povprečno ureditev dolgih osi molekul [5].



Slika 2. Različni fazi smektičnih tekočih kristalov. a) V smektični A fazi so molekule urejene v smektične plasti, kjer so dolge osi molekul pravokotne na smektično plast. b) V smektični C fazi so prav tako molekule urejene v smektične plasti, toda dolge osi molekul so nagnjene glede na pravokotnico na smektično plast [6].

## 2.1 SMEKTIČNA A FAZA

Smektične tekoče kristale sta Georges Friedel in Karl Herrmann obsežno obravnavala že v dvajsetih letih 20. stoletja [4]. Georges Friedel je bil prvi, ki je uporabil besedo smektik. Izraz izhaja grške besede *σμηγμα*, kar pomeni milo, saj so določene mezofaze pokazale mehanske lastnosti, ki so podobne lastnostim mila. Smektiki so bolj urejeni kot nematiki in se pojavijo pri nižjih temperaturah kot nematiki. Iz strukturnega vidika, vsi smektiki tvorijo plastno strukturo z medplastno razdaljo  $d$ , ki jo je možno določiti s sipanjem rentgenske svetlobe. Pri večini smektikov se molekule prosto gibajo v dveh smereh in vrtijo okoli ene osi. Zaradi šibkih privlačnih sil med plastmi glede na lateralne sile med plastmi in molekulami lahko bloki drsijo en prek drugega. Ta lastnost vpliva predvsem na to, da imajo smektiki višjo viskoznost kot nematiki [7].

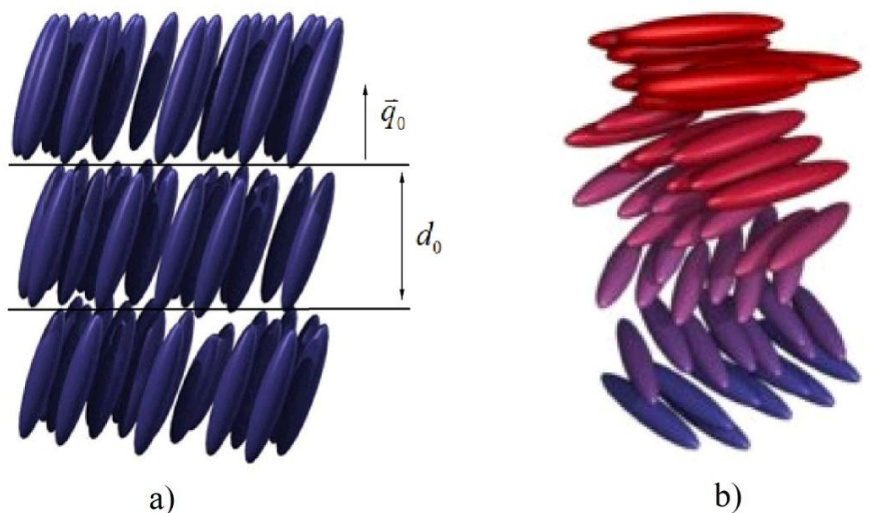
Najenostavnejša oblika smektičnih tekočih kristalov je smektična A faza. Dobimo jo lahko iz ohlajanja nematične faze ali direktno iz izotropne faze. Faza je periodična v eni smeri, v drugih dveh pa se lahko molekule prosto gibajo. Tako je smektična A faza hkrati enodimezionalna trdnina in dvodimenzionalna tekočina. Tekoče kristale tvorijo organske molekule, ki so sestavljene iz benzenovih obročev, na katere so pritrjene dolge alkalne verige. Smer, v katero so v povprečju usmerjene dolge osi molekul, opišemo z nematičnim direktorjem  $\bar{n}$ , ki je brezdimenzijski enotski vektor. Smeri, ki ga opišeta nematična direktorja  $\bar{n}$  in  $-\bar{n}$  sta enakovredni. Gostota  $\tilde{\rho}$  je konstantna v smereh, v katerih se lahko molekule prosto gibajo. V smeri pravokotno na smektične plasti pa lahko gostoto  $\tilde{\rho}$  zapišemo kot periodično funkcijo krajevnega vektorja  $\bar{r}$  [8].

## 2.2 ZVITE DISLOKACIJE V SMEKTIČNI A FAZI

V urejenih snoveh, kjer sočasno delujejo nasprotujoči se ureditveni mehanizmi, pogosto nastanejo defekti. V točki, kjer se nahaja defekt, nekatere ureditvene lastnosti sistema niso več jasno definirane. Za znanstvenike je to področje vedno bolj zanimivo, saj lahko defekti posredujejo pri faznih prehodih med različnimi fazami, zato imajo velik potencial na aplikativnem področju. Tekoči kristali imajo pomembno vlogo pri raziskovanju teh pojavov. Tvorijo zelo bogato paleto različnih defektov in lahko dosežejo ravnovesna stanja zelo hitro [9].

Kiralni tekoči kristali imajo tendenco, da tvorijo holesterično fazo, ki ima vijačno strukturo. V holesterični fazi so dolge osi molekul zasukane okoli sučne osi, ki je pravokotna na nematični direktor. Sosednje molekule so med seboj zasukane za majhen kot. Zasuk molekul tvori direktorsko polje, za katerega je značilna vijačna struktura. Obenem molekularne interakcije favorizirajo strukturo, ki je podobna smektični plastni strukturi (slika 3). Strukture, ki bi imela hkrati lastnosti holesteričnega direktorskega polja in smektično plastno strukturo, ni mogoče tvoriti. Tekmovanje med temi strukturnimi lastnostmi lahko pripelje do strukture sestavljene iz plasti, ki jo povezujejo zvite dislokacije.

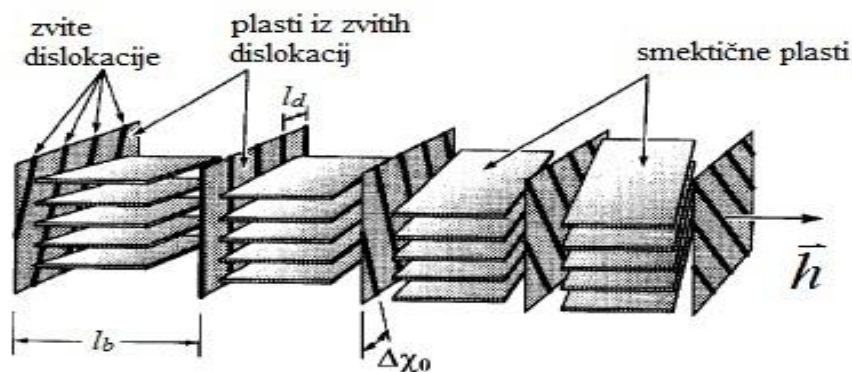
Zvite dislokacije se v smektični A fazi pojavijo pri temperaturah blizu faznega prehoda med nematično holesterično fazo in smektično A fazo tekočih kristalov. Opazovanja faze blizu faznega prehoda so pokazala lastnost selektivnega odboja krožno polarizirane svetlobe. Ta lastnost je pokazala, da tvorijo dolge osi molekul vijačno strukturo podobno tisti v holesterični fazi. Opazovanja z rentgensko svetlobo pa so pokazala plastno strukturo, ki je značilna za smektične faze.



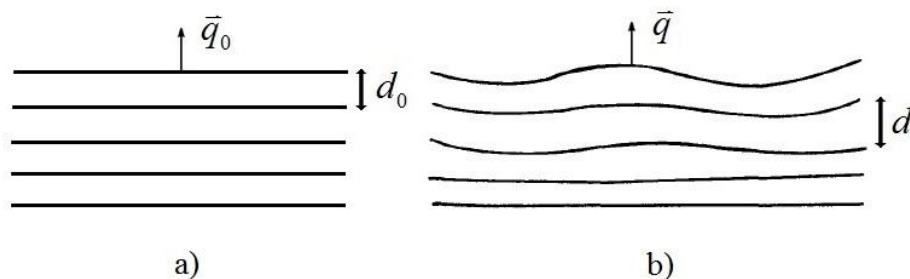
Slika 3. a) Smektič; zaradi molekularnih interakcij se molekule združijo v smektične plasti, ki jih najdemo v smektikih. Debelino idealnih smektičnih plasti označimo z  $d_0 = 2\pi / |\vec{q}_0|$ . b) Holesterik; kiralni tekoči kristali tvorijo holesterično nematično fazo, za katero je značilna vijačna struktura [10].



Slika 4 prikazuje smektične bloke, ki jih ločujejo plasti iz zvitih dislokacij. Sosednji bloki so med seboj zasukani za majhen kot  $\Delta\chi_0$ . Ta zasuk blokov tvori vijačno strukturo. Urejenost molekul je enaka kot v smektični A fazi. Molekule so usmerjene v smeri lokalnega nematičnega direktorja  $\bar{n}$  in urejene v plasti. Smer ureditve smektičnih plasti podaja vektor  $\bar{q}_0$ , ki je pravokoten na smektične plasti, njegova velikost pa je odvisna od debeline smektičnih plasti  $d_0$  kot  $q_0 = 2\pi/d_0$ . Debelina  $d_0$  je nekaj nanometrov. Zaradi motnje se lahko smer in debelina smektičnih plasti spremenita, kar opišemo z vektorjem  $\bar{q}$  in debelino smektičnih plasti  $d = 2\pi/q$  (slika 5). Vektorja  $\bar{q}_0$  in  $\bar{q}$  sta vzporedna z lokalnim nematičnim direktorjem  $\bar{n}$ . Debelina smektičnih blokov  $l_b$  je reda velikosti nekaj 10 nanometrov. Plasti med bloki sestavljajo vzporedne zvite dislokacije. Razdalja med dislokacijami  $l_d$  je podobnega velikostnega reda kot debelina blokov  $l_b$ . Zaradi medsebojnih zasukov smektičnih blokov nastane vijačna struktura. Os  $\bar{h}$ , okoli katere so zasukani bloki, je pravokotna na  $\bar{n}$ . Takšno strukturo lahko razumemo kot nekakšen kompromis med nekompatibilnimi lastnosti holesterične faze, ki se pojavi pri višjih temperaturah, in smektične A faze, ki se pojavi pri nižjih temperaturah [11].



Slika 4. Smektična A faza, ki vsebuje zvite dislokacije. Smektične bloke, ki so med seboj zasukani za  $\Delta\chi_0$ , ločijo plasti iz zvitih dislokacij. Debelina smektičnih blokov  $l_b$  in razdalja med zvitimi dislokacijami  $l_d$  sta velikosti nekaj 10 nanometrov. Smektične plasti so zasukane okoli sučne osi  $\bar{h}$  [9].



Slika 5. a) Idealne in b) neidealne smektične plasti. Idealne (neperturbirane) smektične plasti opišemo z normalnim vektorjem smektičnih plasti  $\bar{q}_0$ . Neidealne (perturbirane) smektične plasti pa opišemo z normalnim vektorjem smektičnih plasti  $\bar{q}$ . Debelino idealnih smektičnih plasti označimo z  $d_0$ , debelino neidealnih smektičnih plasti pa z  $d$ .



### 3 FENOMENOLOŠKI MODEL

Leta 1972 je de Gennes pokazal, da obstaja fenomenološka analogija med faznim prehodom iz kiralne nematske ( $N^*$ ) faze v smektično A (SmA) fazo tekočih kristalov in faznim prehodom kovin iz superprevodnega v normalno prevodno stanje kovin. Za razliko od faznega prehoda superprevodnika tipa II, pa nastopa pri faznem prehodu tekočih kristalov veliko več parametrov, ki vplivajo na strukturo faze. Posledica tega je zelo široka paleta novih možnih tekočokristalnih faz [11]. Z uporabo analogije med tekočimi kristali in superprevodniki je de Gennes pravilno napovedal nastanek strukturnih defektov v smektični A fazi pri temperaturah blizu faznega prehoda, kjer sučna ali upogibna deformacija vplivata na nematični direktor smektične faze.

#### 3.1 UREDITVENI PARAMETER

Različne mezofaze se med seboj razlikujejo po simetriji. Prehod med različnimi fazami ustreza izgubi določenih simetrij in ga lahko opišemo z ureditvenim parametrom. Z ureditvenim parametrom predstavljamo, kako se konfiguracija molekul v manj simetrični fazi razlikuje od konfiguracije molekul v bolj simetrični fazi. V splošnem lahko vrednost ureditvenega parametra postavimo na nič pri manj urejeni fazi in različno od nič pri bolj urejeni fazi [1].

Nematična in smektična A faza imata podoben orientacijski red. Predpostavimo lahko, da je orientacijski ureditveni parameter enak v obeh fazah. Za opis smektične A faze uvedemo nov ureditveni parameter, saj se v smektični A fazi pojavi nov simetrični element: enodimenzionalni pozicijski red [8]. Za pozicijski red je značilna modulacija gostote  $\tilde{\rho}$  v smeri normalnega vektorja smektičnih plasti  $\bar{q}$ . Modulacijo gostote  $\tilde{\rho}$  lahko zapišemo s Fourierovo vrsto:

$$\tilde{\rho}(\bar{r}) = \tilde{\rho}_0 + \sum_{j=1}^{\infty} \tilde{\rho}_j \cos(j[\bar{q} \cdot \bar{r}]) = \tilde{\rho}_0 + \frac{1}{2} \sum_{j=1}^{\infty} \tilde{\rho}_j \left[ e^{i(j[\bar{q} \cdot \bar{r}])} + e^{-i(j[\bar{q} \cdot \bar{r}])} \right], \quad (1)$$

kjer so  $\tilde{\rho}_0$  in  $\tilde{\rho}_j$  koeficienti razvoja Fourierove vrste,  $\bar{r}$  pa je krajevni vektor. Predstavljajmo si rahlo deformacijo smektičnih plasti. To deformacijo lahko opišemo z vektorskim poljem  $\bar{u}$  tako, da vsako točko materiala pred deformacijo opišemo z krajevnim vektorjem  $\bar{r}'$  in po deformaciji s krajevnim vektorjem  $\bar{r}$ :

$$\bar{r}' = \bar{r} - \bar{u}. \quad (2)$$

Gostoto v točki  $\bar{r}$  lahko zapišemo kot:

$$\tilde{\rho}(\bar{r}) = \tilde{\rho}_0 + \frac{1}{2} \tilde{\rho}_1 \left[ e^{i\bar{q} \cdot (\bar{r} - \bar{u})} + e^{-i\bar{q} \cdot (\bar{r} - \bar{u})} \right] + \dots = \tilde{\rho}_0 + \frac{1}{2} \tilde{\rho}_1 \left[ e^{i\bar{q} \cdot \bar{r}} e^{-iM\varphi} + e^{-i\bar{q} \cdot \bar{r}} e^{iM\varphi} \right] + \dots \quad (3)$$

V enačbi (3) smo uvedli fazo  $M\varphi = \bar{q} \cdot \bar{u}$ . Fazo  $\varphi$  imenujemo parameter degenerativnosti in ima vrednost med 0 in  $2\pi$ . Parameter degenerativnosti opisuje zasuk smektičnih plasti glede na referenčno smektično plast  $\varphi = 0$  [12]. Faktor  $M$  je navojno število. Običajno so

deformacije zelo šibkega reda, zato upoštevamo samo prvi člen v Fourierovi vrsti. Ureditveni parameter zapišemo s kompleksnim parametrom  $\psi(\vec{r})$ , ki je z  $\tilde{\rho}(\vec{r})$  povezan preko enačbe:

$$\tilde{\rho}(\vec{r}) = \tilde{\rho}_0(1 + \psi(\vec{r}) + \psi^*(\vec{r})). \quad (4)$$

Kompleksni parameter  $\psi(\vec{r})$  ima obliko:

$$\psi(\vec{r}) = \eta e^{i\phi(\vec{r})}, \quad (5)$$

kjer je faza  $\phi(\vec{r})$  enaka:

$$\phi(\vec{r}) = \vec{q} \cdot \vec{r} + M\varphi. \quad (6)$$

Smektični translacijski ureditveni parameter  $\eta$  predstavlja stopnjo urejenosti smektičnih plasti, faza  $\phi(\vec{r})$  pa opisuje položaj smektičnih plasti.

### 3.2 PROSTA ENERGIJA

V temperaturnem območju blizu temperature  $T_C$ , kjer pride do faznega prehoda med nematsko in SmA fazo, lahko fazni prehod fenomenološko opišemo z Landau – de Gennesovo teorijo. Za kvantitativni opis faze uporabimo prosto energijo  $F$  kot termodinamski potencial. Prosto energijo zapišemo kot vsoto volumskega in površinskega prispevka k energiji:

$$F = \iiint (f_h + f_e^{(s)} + f_e^{(n)}) d^3\vec{r} + \iint f_s d^2\vec{r}, \quad (7)$$

kjer je  $f_h$  homogen člen gostote proste energije,  $f_e^{(s)}$  in  $f_e^{(n)}$  sta elastična člena gostote proste energije in  $f_s$  je površinski člen gostote proste energije. Pri naši obravnavi je opazovan vzorec dovolj velik in lahko zanemarimo površinski prispevek.

Homogen člen gostote proste energije  $f_h$  razvijemo v Taylorjevo vrsto po ureditvenem parametru  $\psi$ . Zaradi simetrijskih lastnosti sistema upoštevamo samo sode člene v razvoju:

$$f_h = \alpha |\psi|^2 + \frac{\beta}{2} |\psi|^4 + \dots = \alpha \eta^2 + \frac{\beta}{2} \eta^4 + \dots \quad (8)$$

Pri temperaturi faznega prehoda  $T_C$  je koeficient  $\alpha$  enak 0, nad to temperaturo pa je vrednost  $\alpha$  pozitivna. V dobrem približku velja:

$$\alpha = \alpha_0 \left( \frac{T - T_C}{T_C} \right). \quad (9)$$

Ko izraz (9) vstavimo v enačbo (8), dobimo:

$$f_h = \alpha_0 \left( \frac{T - T_C}{T_C} \right) \eta^2 + \frac{\beta}{2} \eta^4. \quad (10)$$

Konstanti  $\alpha_0$  in  $\beta$  sta eksperimentalno določeni konstanti materiala. Minimum  $f_h$  v odvisnosti od  $\eta$  določa največjo vrednost translacijskega ureditvenega parametra pri dani temperaturi  $\eta_{\max}(T)$ :

$$\eta_{\max}(T) = \sqrt{\frac{\alpha_0}{\beta} \left( \frac{T_C - T}{T_C} \right)}. \quad (11)$$

V enačbo (11) vpeljemo reducirano temperaturo  $t$ :

$$t = \frac{T_C - T}{T_C}, \quad (12)$$

in temperaturno neodvisen translacijski ureditveni parameter  $\eta_0$ :

$$\eta_0 = \sqrt{\frac{\alpha_0}{\beta}}. \quad (13)$$

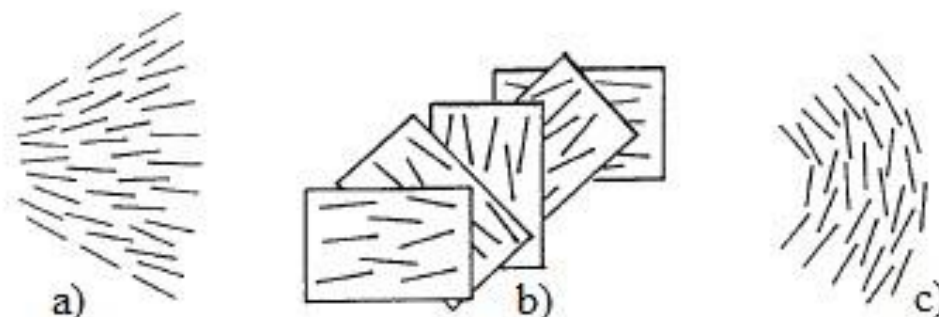
Enačba (11) ima sedaj obliko:

$$\eta_{\max}(T) = \eta_0 \sqrt{t}. \quad (14)$$

Elastični člen gostote proste energije opiše elastični odziv sistema pri spremembi urejenosti smektičnih plasti. Ta člen tvorita nematična  $f_e^{(n)}$  in smektična  $f_e^{(s)}$  komponenta. Nematično komponento opišemo s Frank - Oseenovo formulo za gostoto proste energije ( $f_{FO}$ ):

$$f_{FO} = \frac{1}{2} \left[ K_{11} (\nabla \cdot \bar{n})^2 + K_{22} (\bar{n} \cdot (\nabla \times \bar{n}))^2 + K_{33} (\bar{n} \times (\nabla \times \bar{n}))^2 \right]. \quad (15)$$

Konstante  $K_{11}$ ,  $K_{22}$  in  $K_{33}$  so elastične konstante za pahljačasto, zvojno in upogibno deformacijo (slika 6).



Slika 6. Najpreprostejše elastične deformacije v tekočih kristalih. a) Pahljačasta deformacija; b) zvojna deformacija; c) upogibna deformacija [11].

Pri naši obravnavi bomo upoštevali samo člen za zvojno deformacijo. S to predpostavko ima nematični člen obliko:

$$f_e^{(n)} = \frac{1}{2} K (\bar{n} \cdot (\nabla \times \bar{n}))^2, \quad (16)$$

kjer smo namesto konstante  $K_{22}$  zapisali  $K$ . Smektična komponenta pa ima obliko:

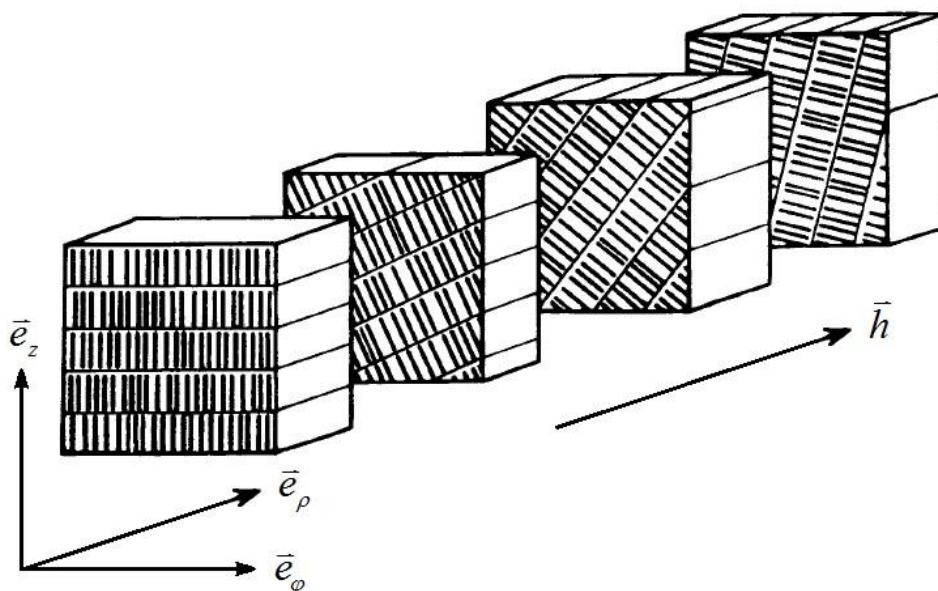
$$f_e^{(s)} = C_{\perp} |(\bar{n} \times \nabla)\psi|^2 + C_{\parallel} |(\bar{n} \cdot \nabla - iq_0)\psi|^2. \quad (17)$$

Člena v enačbi (17) vsebujeta elastični konstanti  $C_{\perp}$  in  $C_{\parallel}$ , ki sta povezani z smektičnim upogibom ( $C_{\perp}$ ) in stisljivostjo ( $C_{\parallel}$ ). Prvi člen želi poravnati normalni vektor smektičnih plasti  $\bar{q}$  z lokalnim nematičnim direktorjem  $\bar{n}$ , drugi člen pa želi stisniti smektične plasti na konstantno razdaljo  $d_0 = 2\pi/|\bar{q}_0|$  [13]. Pri naši obravnavi bomo vrednosti obeh elastičnih konstant enačili  $C_{\perp} = C_{\parallel} = C$ .

Za obravnavo zvite dislokacije, izrazimo  $\bar{n}$  v odvisnosti od kota  $\mathcal{G}$ :

$$\bar{n} = 0 \cdot \bar{e}_{\rho} + \sin \mathcal{G} \cdot \bar{e}_{\varphi} + \cos \mathcal{G} \cdot \bar{e}_z, \quad (18)$$

kjer so  $\bar{e}_{\rho}$ ,  $\bar{e}_{\varphi}$  in  $\bar{e}_z$  enotski vektorji (slika 7) v cilindričnem koordinatnem sistemu  $(\rho, \varphi, z)$ ,  $\mathcal{G}$  pa je kot med  $\bar{e}_z$  in  $\bar{n}$  [9].



Slika 7. Cilindrični koordinatni sistem  $(\rho, \varphi, z)$  s trojico enotskih vektorje  $\bar{e}_{\rho}$ ,  $\bar{e}_{\varphi}$  in  $\bar{e}_z$ . Enotski vektor  $\bar{e}_{\rho}$  je vzporeden s sučno osjo  $\bar{h}$  [11].

Nematični direktor  $\bar{n}$  iz enačbe (18) in kompleksni ureditveni parameter  $\psi(\bar{r})$  iz enačbe (5) vstavimo v enačbi (16) in (17) in dobimo:

$$f_e^{(n)} = \frac{K}{2} \left( \frac{\partial \mathcal{G}}{\partial \rho} \right)^2, \quad (19)$$

$$f_e^{(s)} = C \left[ \left( \frac{\partial \eta}{\partial \rho} \right)^2 + \eta^2 \left( \frac{M^2}{\rho^2} + q^2 + q_0^2 - 2qq_0 \cos \vartheta - \frac{2Mq_0}{\rho} \sin \vartheta \right) \right]. \quad (20)$$

Za lažjo obravnavo uvedemo brezdimenzijsko spremenljivko  $y$  :

$$y = \frac{\eta}{\eta_0}, \quad (21)$$

ki predstavlja normirano vrednost translacijsko ureditvenega parametra, in brezdimenzijsko koordinato  $x$  :

$$x = \frac{\rho}{k}, \quad (22)$$

ki pa predstavlja normiran radij v cilindričnem koordinatnem sistemu. Parameter  $k$  je normalizacijski faktor. Brezdimenzijsko spremenljivko  $y$  in koordinato  $x$  vstavimo v enačbo (10):

$$f_h = \alpha \eta_0^2 \left( -ty^2 + \frac{y^4}{2} \right), \quad (23)$$

enačbo (19):

$$f_e^{(n)} = \frac{K}{2k^2} \left( \frac{\partial \mathcal{G}}{\partial x} \right)^2, \quad (24)$$

in enačbo (20):

$$f_e^{(s)} = \frac{C\eta_0^2}{k^2} \left[ \left( \frac{\partial y}{\partial x} \right)^2 + y^2 k^2 \left( \frac{M^2}{x^2} + q^2 + q_0^2 - 2qq_0 \cos \vartheta - \frac{2Mq_0}{x} \sin \vartheta \right) \right]. \quad (25)$$

Enačbe (23), (24) in (25) preoblikujemo tako, da vpeljemo brezdimenzijski homogen člen gostote proste energije  $\tilde{f}_h$  :

$$\tilde{f}_h = -ty^2 + \frac{y^4}{2}, \quad (26)$$

brezdimenzijsko nematično komponento elastičnega člena  $\tilde{f}_e^{(n)}$  :

$$\tilde{f}_e^{(n)} = \frac{1}{2} \left( \frac{\partial \mathcal{G}}{\partial \rho} \right)^2, \quad (27)$$

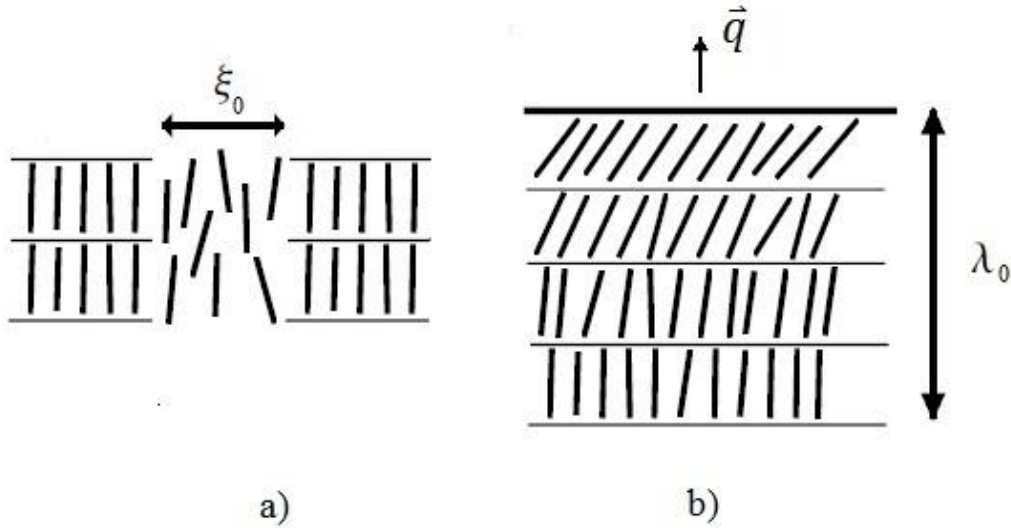
in brezdimenzijsko smektično komponento elastičnega člena  $\tilde{f}_e^{(s)}$ :

$$\tilde{f}_e^{(s)} = \left( \frac{\partial y}{\partial x} \right)^2 + y^2 k^2 \left( \frac{M^2}{x^2} + q^2 + q_0^2 - 2qq_0 \cos \vartheta - \frac{2Mq_0}{x} \sin \vartheta \right). \quad (28)$$

Celotna gostota proste energije  $f$  ima sedaj obliko:

$$f = \frac{C\eta_0^2}{k^2} \left[ \frac{k^2}{\xi_0^2} \tilde{f}_h + \lambda_0^2 q_0^2 \tilde{f}_e^{(n)} + \tilde{f}_e^{(s)} \right], \quad (29)$$

kjer je  $\xi_0 = \sqrt{C/\alpha_0}$  korelacijska dolžina, ki nam pove, kako daleč seže odziv sistema na lokalno perturbacijo, in  $\lambda_0 = \sqrt{K/Cq_0^2\eta_0^2}$  penetracijska dolžina, ki je tipična dolžina, na kateri se pozna vpliv zasuka smektičnih blokov (slika 8).



Slika 8. Odziv tekočih kristalov izrazimo z korelacijsko  $\xi_0$  in penetracijsko  $\lambda_0$  dolžino.  
a) Korelacijska dolžina nam pove, do kod seže odziv tekočih kristalov na lokalno motnjo;  
b) Penetracijska dolžina nam pove, kolikšna dolžina je potrebna, da se molekule ponovno poravnajo z normalnim vektorjem smektičnih plasti  $\vec{q}$  [12].

Za nadaljnjo obravnavo zapišemo  $f$  v brezdimenzijski obliki  $\tilde{f}$ :

$$\tilde{f} = \frac{k^2}{\xi_0^2} \tilde{f}_h + \lambda_0^2 q_0^2 \tilde{f}_e^{(n)} + \tilde{f}_e^{(s)}. \quad (30)$$

### 3.3 EULER-LAGRANGEOVE ENAČBE

Vsak fizikalni sistem teži k takšni konfiguraciji, kjer bo celotna energija sistema minimalna. Za določitev vrednosti krajevno odvisnih spremenljivk v gostoti proste energije, ki bodo

minimizirale energijo sistema, uporabimo Euler – Lagrangeovo enačbo. Spremenljivki, ki ju bomo opazovali, sta  $y$  in  $\vartheta$ .

V cilindričnem koordinatnem sistemu zapišemo  $F$  kot:

$$F = \iiint f \rho d\varphi d\rho dz. \quad (31)$$

Če uporabimo brezdimenzijsko koordinato  $x$ , ki je z  $\rho$  povezana preko enačbe (22), enačbo (31) preoblikujemo v:

$$F = \iiint f k x dx d\varphi dz. \quad (32)$$

Predpostavili bomo, da je  $f$  funkcija spremenljivk  $x$ ,  $y$  in  $dy/dx$ . Vrednost brezdimenzijske spremenljivke  $y$ , ki bo minimizirala  $f$ , odmaknemo od pravilne vrednosti za majhno vrednosti  $\varepsilon g(x)$ :

$$\hat{y}(x) = y(x) + \varepsilon g(x), \quad (33)$$

kjer je  $\hat{y}(x)$  nova vrednost spremenljivke  $y(x)$ ,  $\varepsilon$  je majhen skalar in  $g(x)$  je poljubna funkcija, s katero smo odmaknili rešitev od pravilne vrednosti. Kadar bo skalar  $\varepsilon$  enak nič, bo rešitev imela pravo vrednost. Vemo tudi, da je prvi odvod proste energije  $\partial F/\partial \varepsilon$  enak nič, kadar imamo pravilno rešitev. Tako lahko  $\partial F/\partial \varepsilon$  zapišemo:

$$\left. \frac{\partial F}{\partial \varepsilon} \right|_{\varepsilon=0} = \iiint \left[ \frac{\partial f}{\partial y} g(x) + \frac{\partial f}{\partial y'} g'(x) \right] k^2 x dx d\varphi dz = 0, \quad (34)$$

kjer je  $y' = dy/dx$  in  $g' = dg/dx$ . Celoten oklepaj v enačbi (34) je odvisen od brezdimenzijske koordinate  $x$ . Zato moramo vstaviti  $x$ , ki se nahaja zunaj oklepaja, v oklepaj:

$$\left. \frac{\partial F}{\partial \varepsilon} \right|_{\varepsilon=0} = \iiint \left[ x \frac{\partial f}{\partial y} g(x) + x \frac{\partial f}{\partial y'} g'(x) \right] k^2 dx d\varphi dz = 0. \quad (35)$$

Pri oklepaju v enačbi (35) želimo izpostaviti funkcijo  $g(x)$ . Za preoblikovanje drugega člena uporabimo formulo za integriranje *per partes* in dobimo:

$$\int x \frac{\partial f}{\partial y'} g'(x) dx = x \frac{\partial f}{\partial y'} g(x) - \int \frac{d}{dx} \left( x \frac{\partial f}{\partial y'} \right) g(x) dx. \quad (36)$$

Enačba (35) ima sedaj obliko:

$$\left. \frac{\partial F}{\partial \varepsilon} \right|_{\varepsilon=0} = \iiint \left[ x \frac{\partial f}{\partial y} - \frac{d}{dx} \left( x \frac{\partial f}{\partial y'} \right) \right] g(x) k^2 dx d\varphi dz + x \frac{\partial f}{\partial y'} g(x) = 0. \quad (37)$$



Za zadnji člen v enačbi (37) lahko predpostavimo, da je v mejah integracije enak nič. Predpostavili smo, da je  $g(x)$  poljubna funkcija. Enačba (37) mora veljati ne glede na izbiro funkcije  $g(x)$ , zato mora biti:

$$x \frac{\partial f}{\partial y} - \frac{d}{dx} \left( x \frac{\partial f}{\partial y'} \right) = 0. \quad (38)$$

Enačba (38) je Euler – Lagrangeova enačba. Enak postopek naredimo za kot  $\vartheta$  in dobimo:

$$x \frac{\partial f}{\partial \vartheta} - \frac{d}{dx} \left( x \frac{\partial f}{\partial \vartheta'} \right) = 0. \quad (39)$$

Pri naši obravnavi bomo namesto  $f$  vstavili  $\tilde{f}$  v enačbo (38):

$$x \frac{\partial \tilde{f}}{\partial y} - \frac{d}{dx} \left( x \frac{\partial \tilde{f}}{\partial y'} \right) = 0, \quad (40)$$

in v enačbo (39):

$$x \frac{\partial \tilde{f}}{\partial \vartheta} - \frac{d}{dx} \left( x \frac{\partial \tilde{f}}{\partial \vartheta'} \right) = 0. \quad (41)$$

Ko vstavimo enačbo (30) v enačbo (40) in celoten izraz preoblikujemo, dobimo:

$$\frac{\partial^2 y}{\partial x^2} + \frac{1}{x} \frac{\partial y}{\partial x} - y \left[ \frac{k^2}{\xi_0^2} (t + y^2) + \left( \frac{M^2}{x^2} + k^2 (q^2 + q_0^2 - 2qq_0 \cos \vartheta) - \frac{2Mq_0}{x} \sin \vartheta \right) \right] = 0. \quad (42)$$

Ko vstavimo enačbo (30) v enačbo (41) ter celoten izraz preoblikujemo, pa dobimo:

$$\frac{\partial^2 \vartheta}{\partial x^2} + \frac{1}{x} \frac{\partial \vartheta}{\partial x} - \frac{y^2}{\lambda_0^2 q_0^2} \left( 2qq_0 k^2 \sin \vartheta - \frac{2Mq_0}{x} \cos \vartheta \right) = 0. \quad (43)$$

Dobili smo dve sklopljeni nehomogeni diferencialni enačbi za spremenljivki  $\vartheta$  in  $y$ . Takšne enačbe nimajo analitičnih rešitev, zato jih je potrebno reševati numerično.

### 3.4 NUMERIČNO RAČUNANJE

Enačbi (42) in (43) imata obliko:

$$en(A(x)) = 0, \quad (44)$$

kjer  $en(A(x))$  predstavlja enačbi (42) in (43),  $A(x)$  pa predstavlja ali  $y(x)$  ali  $\vartheta(x)$ . Naša naloga je poiskati takšno vrednost  $A(x)$ , da bo veljala enačba (44) za vsak  $x$ .  $A(x)$  preoblikujemo iz kontinuitetne v diskretno funkcijo koordinate  $x$  tako, da velja:

$$A(x) = A_i, \quad (45)$$

in:

$$A(x + \Delta x) = A_{i+1}, \quad (46)$$

kjer je  $\Delta x$  majhna sprememba parametra  $x$ . Enačba (44) ima sedaj obliko:

$$en(A_i) = 0. \quad (47)$$

Vrednosti parametra  $A_i$  ne poznamo, zato jo poskusimo uganiti. Enačbo (47) lahko zapišemo kot:

$$en(A_i^{(star)} + \Delta A_i) = 0, \quad (48)$$

kjer je  $A_i^{(star)}$  vrednost parametra blizu rešitve,  $\Delta A_i$  pa je popravek, ki nam bo dal pravilno rešitev. Za popravek  $\Delta A_i$  velja:

$$\Delta A_i = A_i^{(nov)} - A_i^{(star)}. \quad (49)$$

Enačbo (48) razvijemo v Taylorjevo vrsto in dobimo:

$$en(A_i^{(star)} + \Delta A_i) \approx en(A_i^{(star)}) + \frac{\partial en(A_i^{(star)})}{\partial A_i^{(star)}} \Delta A_i. \quad (50)$$

Iz enačb (48), (49) in (50) izrazimo  $A_i^{(nov)}$ , ki ga sedaj lahko izračunamo po enačbi:

$$A_i^{(nov)} = A_i^{(star)} - \frac{en(A_i^{(star)})}{\left( \frac{\partial en(A_i^{(star)})}{\partial A_i^{(star)}} \right)}. \quad (51)$$

Dobljeno vrednost  $A_i^{(nov)}$  vstavimo nazaj v enačbo (51) in ta izračun opravljamo tako dolgo, da bo razlika med  $A_i^{(nov)}$  in  $A_i^{(star)}$  reda  $10^{-5}$ . Ob upoštevanju, da sta enačbi (42) in (43) sklopljeni (rešujemo ju sočasno) in da odvod prvega in drugega reda zapišemo kot:

$$\frac{\partial A(x)}{\partial x} = \frac{A_{i+1} - A_{i-1}}{2\Delta x}, \quad (52)$$

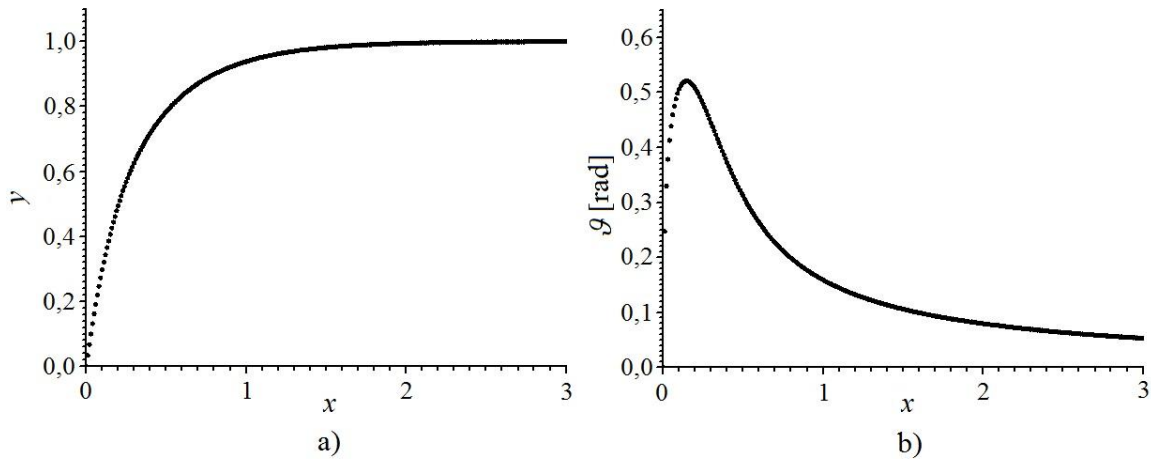
in:

$$\frac{\partial^2 A(x)}{\partial x^2} = \frac{A_{i+1} + A_{i-1} - 2A_i}{(\Delta x)^2}, \quad (53)$$

določimo vrednosti parametrov  $y_i^{(nov)}$  in  $g_i^{(nov)}$ , tako da bo izpolnjena enačba (47).

## 4 VPLIV NANODELCEV NA ZVITE DISLOKACIJE

Zanima nas vpliv nanodelcev na zvite dislokacije v smektični A fazi tekočih kristalov. Sam vpliv nanodelcev bomo izrazili z  $y = \eta/\eta_0$ , kjer nam smektični translacijski ureditveni parameter  $\eta$  pove, kolikšna je stopnja urejenosti v smektičnih plasteh, in s  $\mathcal{G}$ , ki izraža orientacijo dolge osi molekul. Najprej si bomo ogledali vzorec brez nanodelcev (slika 9).

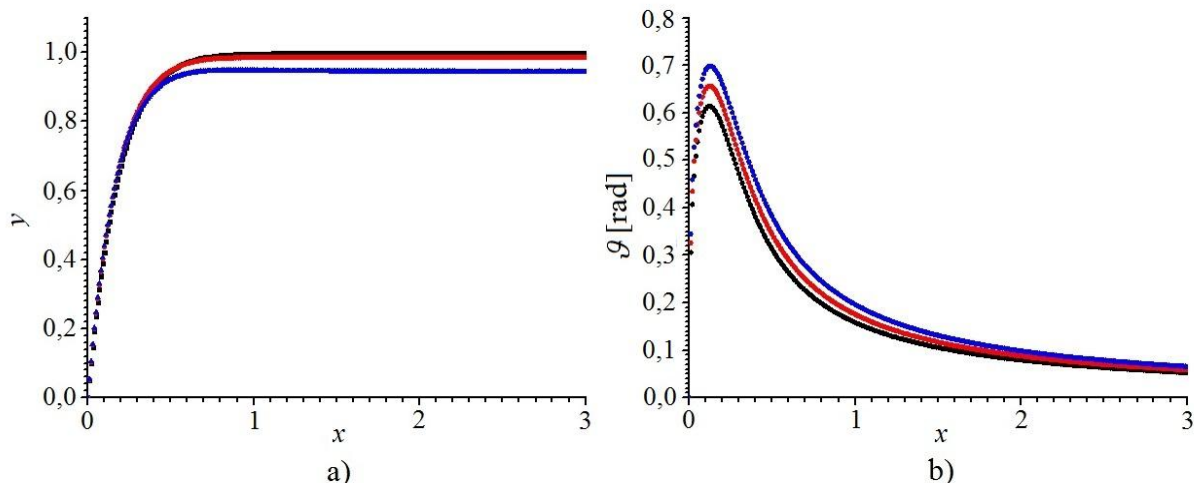


Slika 9. a) Graf relativne velikosti smektičnega ureditvenega parametra  $y = \eta/\eta_0$  v odvisnosti od oddaljenosti od jedra dislokacije  $x = \rho/k$ . b) Graf kota  $\mathcal{G}$  v odvisnosti od oddaljenosti od jedra dislokacije  $x = \rho/k$ . Za simulacijo smo uporabili parametre z vrednostmi  $q_0^2 k^2 = 4\pi^2$ ,  $q^2 k^2 = 4\pi^2$ ,  $t = 2$ ,  $k^2/\xi_0^2 = 1$  in  $\lambda_0^2 q_0^2 = 1$ .

Na sliki 9 vidimo, da gre smektični translacijski ureditveni parameter proti nič, ko se približujemo jedru dislokacije. V bližini jedra je tekoči kristal v nematični fazi, z oddaljevanjem od jedra pa se pričnejo molekule urejati v smektične plasti [9]. Krajevna odvisnost kota  $\mathcal{G}$  kaže, da z oddaljevanjem od jedra dislokacije  $\mathcal{G}$  najprej močno naraste, nato pa prične njegova vrednost padati proti ravnovesnemu stanju. Dolge osi molekul se močno odklonijo od referenčne vrednosti in se nato ustalijo v določeni smeri, kar se ujema z opazovanji, saj so smektični bloki med seboj zasukani.

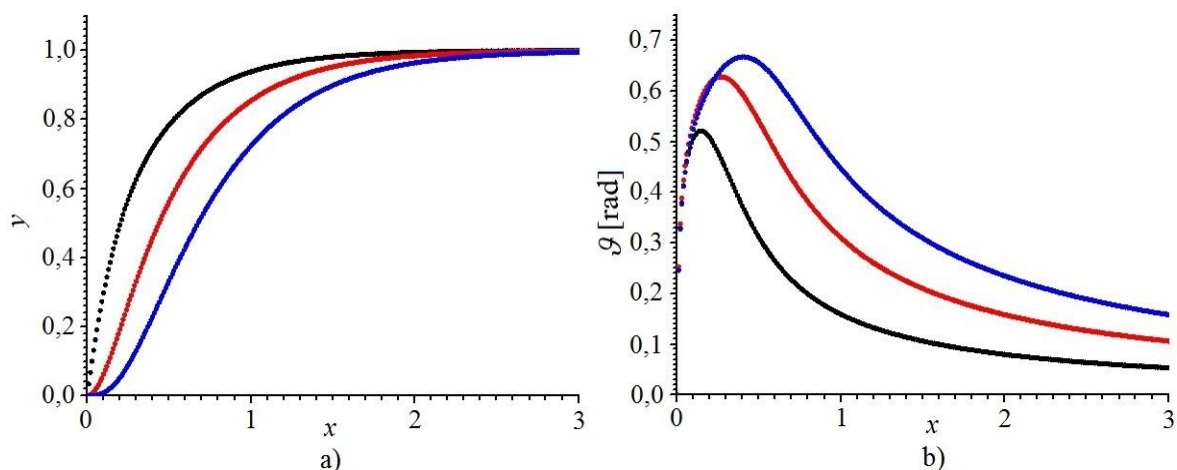
Sedaj si bomo ogledali vpliv različnih vrednosti normalnega vektorja smektičnih plasti  $\bar{q}$  (slika 10) in navojnega števila  $M$ , ki nam opiše jakost zvitih dislokacij (slika 11) na opazovan vzorec.

Na sliki 10 vidimo, da z manjšanjem normalnega vektorja smektičnih plasti  $\bar{q}$  pada ravnovesna vrednost brezdimenzijskega parametra  $y$ . Ko zmanjšamo  $\bar{q}$ , povečamo razdaljo med smektičnimi plastmi. S tem damo molekulam možnost gibanja tudi v smeri  $\bar{q}$ , kar posledično povzroči manjšo urejenost smektičnih plasti. Prav tako pa vidimo, da se z manjšanjem  $\bar{q}$  molekule močneje odklonijo od referenčne vrednosti.



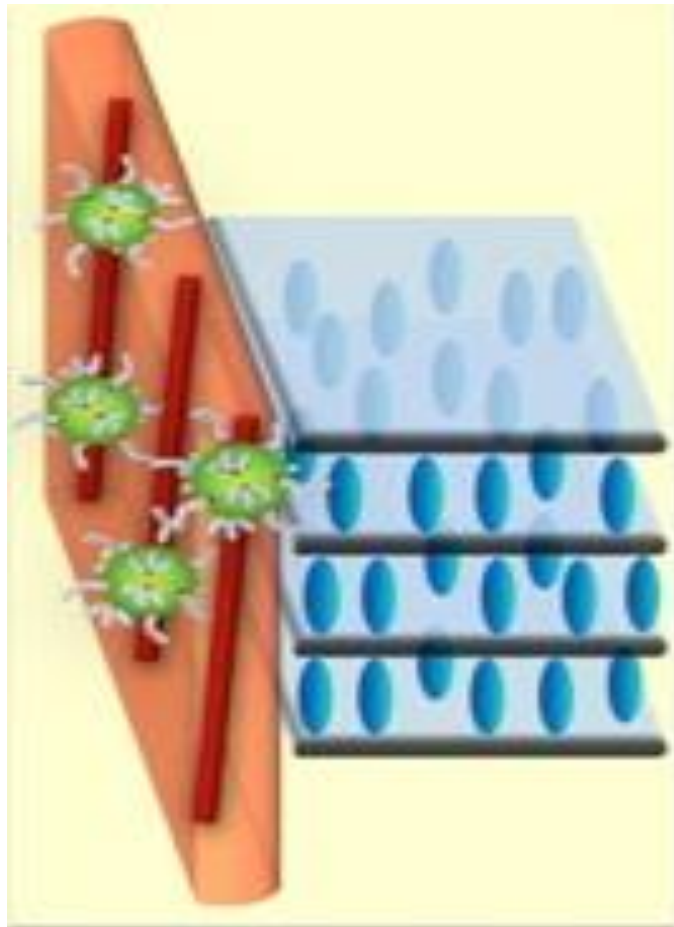
Slika 10. a) Graf relativne velikosti smektičnega ureditvenega parametra  $y = \eta/\eta_0$  v odvisnosti od oddaljenosti od jedra dislokacije  $x = \rho/k$ . b) Graf kota  $\mathcal{G}$  v odvisnosti od oddaljenosti od jedra dislokacije  $x = \rho/k$ . Črne točke predstavljajo vrednost  $|\bar{q}| = |\bar{q}_0|$ , rdeče točke  $|\bar{q}| = 0,9|\bar{q}_0|$  in modre točke  $|\bar{q}| = 0,8|\bar{q}_0|$ .

Iz slike 11 razberemo, da z večanjem navojnega števila  $M$  brezdimenzijski parameter  $y$  dosega maksimalno vrednost pri večji oddaljenosti od jedra dislokacije. Večji kot je  $M$ , bolj je jedro obdano z molekulami, ki se obnašajo kot nematik. Vidimo tudi, da je odklon molekul in vrednost ravnovesnega stanja večja pri večjem  $M$ . S tem je kot med smektičnimi plastmi večji.



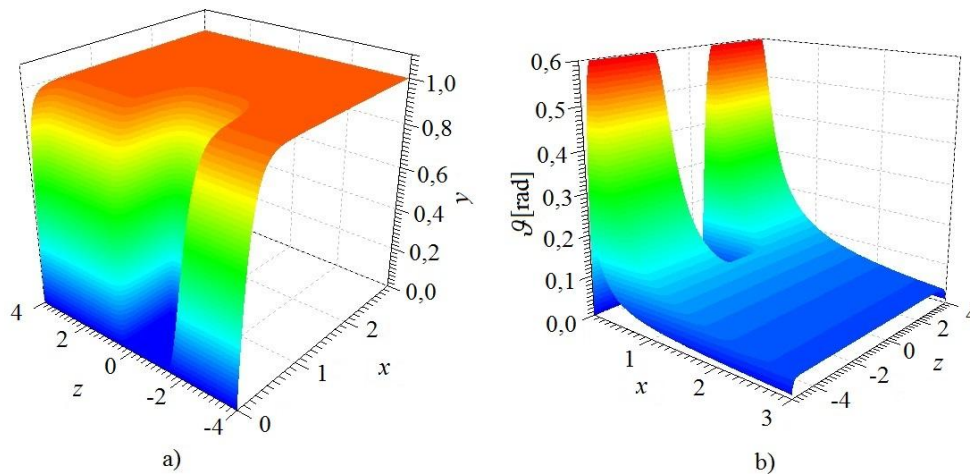
Slika 11. a) Graf relativne velikosti smektičnega ureditvenega parametra  $y = \eta/\eta_0$  v odvisnosti od oddaljenosti od jedra dislokacije  $x = \rho/k$ . b) Graf kota  $\mathcal{G}$  v odvisnosti od oddaljenosti od jedra dislokacije  $x = \rho/k$ . Črne točke predstavljajo vrednost  $M = 1$ , rdeče točke  $M = 2$  in modre točke  $M = 3$ .

V naš opazovan vzorec damo  $N$  nanodelcev cilindrične oblike, ki v jedru dislokacije zavzamejo prostor cilindrične oblike  $V = (\pi r_{ND}^2 h_{ND})N$  (slika 12). Parameter  $r_{ND}$  predstavlja polmer nanodelca, parameter  $h_{ND}$  pa višino nanodelca. Z nanodelci lahko reguliramo različne pogoje na površini volumna, ki ga zavzamejo. Ogleдали si bomo tri različne pogoje na površini volumna, ki ga zavzamejo nanodelci. Prvi povzroča, da je na površini nanodelcev tekoči kristal v nematski fazi (slika 13). Drugi povzroča, da se dolge osi molekul tekočega kristala na površini nanodelcev orientirajo vzporedno z osjo zvite dislokacije (slika 14). Tretji povzroča, da se dolge osi molekul tekočega kristala na površini nanodelcev orientirajo pravokotno na os zvite dislokacije (slika 15).



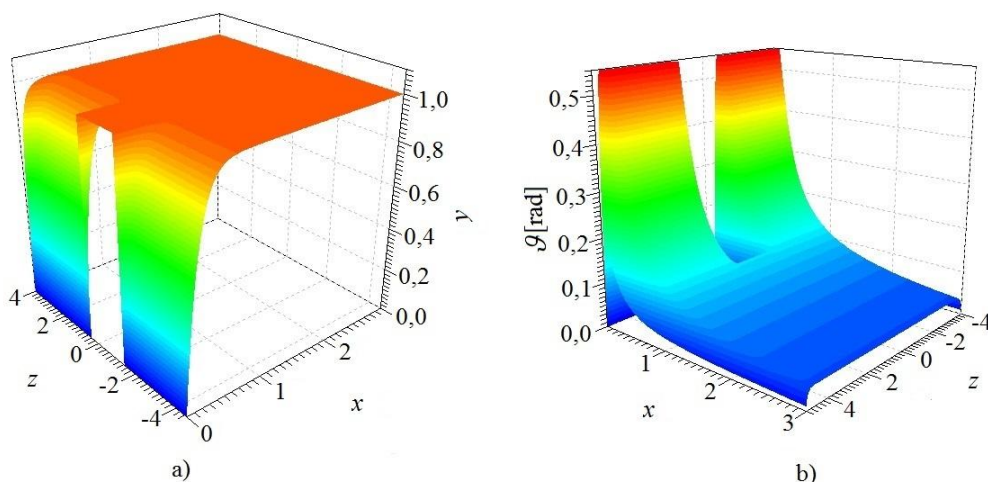
Slika 12: Nanodelci znotraj zvite dislokacij. Prikazan je primer, kjer so v zvite dislokacije dodani nanodelci krogelne oblike. Z nanodelci je možno regulirati različne robne pogoje na površini volumna, ki ga zavzamejo [3].

Na sliki 13 vidimo, da je sama oblika smektičnega translacijskega ureditvenega parametra nespremenjena v primerjavi s primerom, ko ni nanodelcev (slika 8). Edina razlika, ki jo opazimo, je, da začne  $y$  naraščati šele na robu volumna, ki ga zavzemajo nanodelci. Pri kotu  $\vartheta$  razlika nastopi le v volumnu, ki ga zajemajo nanodelci. Vidimo, da ne pride do močnega odklona molekul, ampak do mirnega prehoda v ravnovesno stanje.



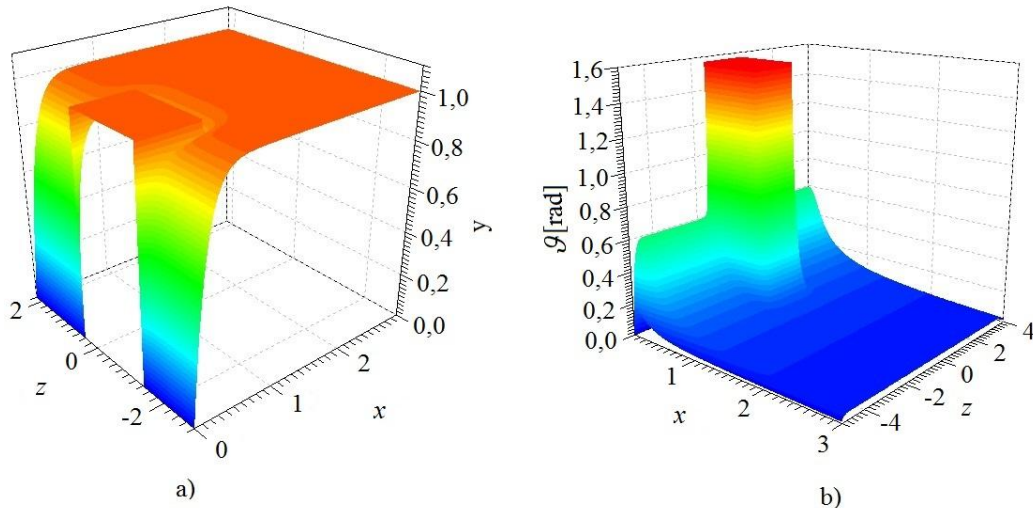
Slika 13. a) Graf relativne velikosti smektičnega ureditvenega parametra  $y = \eta/\eta_0$  v odvisnosti od oddaljenosti od jedra dislokacije  $x = \rho/k$ . b) Graf kota  $\mathcal{G}$  v odvisnosti od oddaljenosti od jedra dislokacije  $x = \rho/k$ . Na površini volumna, ki ga zavzemajo nanodelci, tvorimo robni pogoj, kjer je jedro dislokacije v nematski fazi.

Drugi možen robni pogoj na površini nanodelcev je, da so vse molekule vzporedne z osjo, okoli katere je tvorjena zvita dislokacija (slika 14). Podobno kot v primeru, kjer nimamo nanodelcev (slika 9), je stopnja urejenosti smektičnih plasti enaka na območju izven volumna, ki ga zavzemajo nanodelci. Znotraj volumna, ki ga zavzamejo nanodelci, pa stopnja urejenosti smektičnih plasti že zajema maksimalno vrednost, torej so molekule že urejene v smektične plasti. Podobno kot na sliki 13, poteče prehod v ravnovesno stanje brez močnega odklona molekul.



Slika 14. a) Graf relativne velikosti smektičnega ureditvenega parametra  $y = \eta/\eta_0$  v odvisnosti od oddaljenosti od jedra dislokacije  $x = \rho/k$ . b) Graf kota  $\mathcal{G}$  v odvisnosti od oddaljenosti od jedra dislokacije  $x = \rho/k$ . Robni pogoj, ki ga tvorimo na površini nanodelcev, povzroči, da se molekule orientirajo vzporedno z osjo, okoli katere je tvorjena zvita dislokacija.

Tretji možen robni pogoj na površini nanodelcev je, da so vse molekule orientirane pravokotno glede na os, okoli katere je tvorjena zvita dislokacija (slika 15). Podobno kot v primeru, kjer se molekule orientirajo vzporedno z osjo zvite dislokacije na sliki 14, tudi v tem primeru dosega smektični translacijski ureditveni parameter maksimalno vrednost znotraj volumna, ki ga zavzemajo nanodelci. Imamo torej urejene smektične plasti, ki pa so zelo močno odklonjene od referenčne vrednosti.



Slika 15. a) Graf relativne velikosti smektičnega ureditvenega parametra  $y = \eta/\eta_0$  v odvisnosti od oddaljenosti od jedra dislokacije  $x = \rho/k$ . b) Graf kota  $\mathcal{G}$  v odvisnosti od oddaljenosti od jedra dislokacije  $x = \rho/k$ . Robni pogoj, ki ga tvorimo na površini nanodelcev, povzroči, da se molekule orientirajo pravokotno na os, okoli katere je tvorjena zvita dislokacija.

## 5 ZAKLJUČEK

V diplomskem seminarju smo obravnavali vpliv nanodelcev na zvite dislokacije v smektični A fazi tekočih kristalov. Ogledali smo si lastnosti smektičnih faz, lastnosti zvutih dislokacij, v kakšnem okolju nastanejo in pod katerimi pogoji. Za opis zvutih dislokacij smo uvedli smektični translacijski ureditveni parameter, ki je povezan z modulacijo gostote v smektičnih plasteh. Celotni sistem smo opisali z Landau – de Gennesovo teorijo, v kateri smo upoštevali vpliv faznega prehoda, deformacij v nematični fazi in deformacij v smektični fazi. S sistemom Euler – Lagrangeovih enačb smo iskali ravnovesno stanje sistema v odvisnosti od relativne velikosti smektičnega ureditvenega parametra  $y$ , s katerim opišemo relativno urejenost molekul v smektičnih plasteh in kotom  $\mathcal{G}$ , s katerim opišemo orientacijski red molekul. Dobili smo dve sklopljeni nehomogeni diferencialni enačbi, ki smo ju reševali numerično z Eulerjevo metodo. Izkazalo se je, da se v področju zvite dislokacije tekoči kristal nahaja v nematski fazi in se z oddaljevanjem od jedra pričnejo molekule urejati v smektične plasti. Prav tako smo ugotovili, da se v bližini dislokacije dolge osi molekul zelo odklonijo od referenčne vrednosti. Na večjih oddaljenostih od dislokacije se dolge osi molekul nato orientirajo v ravnovesno stanje, kjer so za majhen kot odklonjene od referenčne vrednosti  $\mathcal{G} = 0$  (slika 9).



Nato smo v jedro zviti dislokacij vstavili nanodelce. Z nanodelci lahko na površju volumna, ki ga zavzamejo, reguliramo različne robne pogoje. Prvi izmed teh je bil, da je na površini dislokacije tekoči kristal v nematski fazi (slika 13). Drugi povzroča, da se molekule orientirajo vzporedno z osjo, okoli katere je tvorjena zvita dislokacija (slika 14). Tretji pa povzroči, da se molekule orientirajo pravokotno na os, okoli katere je tvorjena zvita dislokacija (slika 15). Rezultate teh simulacij smo primerjali z rezultati, kjer ni nanodelcev v jedru dislokacije. V prvem primeru se pričneje molekule tekočega kristala urejati v smektične plasti šele na robu volumna, ki ga zajemajo nanodelci in se pri tem ne odklonijo močno od referenčne vrednosti  $\mathcal{G} = 0$ . V drugem primeru se molekule obnašajo, kot da bi se v volumnu, ki ga zavzemajo nanodelci, nahajale molekule urejene v smektične plasti. Posledično je relativna urejenost smektičnih plasti na robu volumna, ki ga zavzemajo nanodelci, maksimalna. Ob tem molekule niso močno odklonjene od referenčne vrednosti  $\mathcal{G} = 0$ . V tretjem primeru je, enako kot v drugem primeru, relativna urejenost smektičnih plasti maksimalna na robu volumna, ki ga zavzemajo nanodelci, vendar so molekule, zaradi robnega pogoja, močno odklonjene od referenčne vrednosti  $\mathcal{G} = 0$ .

V diplomskem seminarju smo obravnavali zgolj odziv sistema z zvitemi dislokacijami, v katere smo vstavili nanodelce. Pri nadaljnji obravnavi bi lahko poiskali eksperimentalno pridobljene vrednosti parametrov  $\alpha_0$  in  $\beta$ , ki nastopata v enačbi (10), konstanti smektičnega upogiba  $C_{\parallel}$  in stisljivosti  $C_{\perp}$ , jakost zvojne dislokacije  $K$  ter debelino smektičnih plasti  $d_0$  in jih vstavili v simulacijo. Prav tako smo zanemarili površinske prispevke k prosti energiji. Upoštevali bi lahko tudi pahljačasto in upogibno deformacijo pri prosti energiji sistema in opazovali, kako se sistem odzove. Opazovali bi lahko tudi odziv sistema pri spremembi temperature. Zanimivo bi bilo pogledati aplikativne možnosti takšnega sistema, npr. za reguliranje polariziranosti svetlobe z nanodelci, detekcijo virusov in termodinamsko stabilizacijo sistemov z nanodelci.

## LITERATURA IN VIRI

- [1] S. Singh, *Liquid Crystals Fundamentals* (World Scientific, Singapore, 2002).
- [2] W. F. Brinkman in P. E. Cladis, *Defects in liquid crystals*, Phys. Today **35** (48), 5 (1982).
- [3] G. Cordoyiannis, V. S. R. Jampani, S. Kralj, S. Dhara, V. Tzitzios, G. Basina, G. Nounesis, Z. Kutnjak, C. S. P. Tripathi, P. Losada-Pérez, D. Jesenek, C. Glorieux, I. Mušević, A. Zidanšek, H. Ameinitsch in J. Thoen, *Different modulated structures of topological defects stabilized by adaptive targeting nanoparticles*, Soft Matter **9**, 3956 (2013).
- [4] J. D. Brock, R. J. Birgeneau, J. D. Litster in A. Aharony, *Liquids, Crystals and Liquid Crystals*, Phys. Today **42** (52), 7 (1989).
- [5] S. S. Kim, *Fundamentals of Active-Matrix Liquid-Crystal Displays*, Pridobljeno 12. 2. 2013, iz <http://dc93.4shared.com/doc/NMvqG1Bx/preview.html>
- [6] Barrett Research Group, *Introduction to Liquid Crystals*. Pridobljeno 19. 6. 2013, iz [http://barrett-group.mcgill.ca/tutorials/liquid\\_crystal/LC02.htm](http://barrett-group.mcgill.ca/tutorials/liquid_crystal/LC02.htm) .
- [7] P. G. de Gennes in J. Prost, *The Physics of Liquid Crystals* (Clarendon Press, Oxford, 1993).
- [8] L. M. Blinov, *Structure and Properties of Liquid Crystals* (Springer, New York, 2011).
- [9] S. Kralj in T. J. Sluckin, *Core structure of a screw disclination in smectic-A liquid crystals*, Phys. Rev. E **48**, R3244 (1993).
- [10] Connexions, *The Analysis of Liquid Crystal Phases using Polarized Optical Microscopy*, Pridobljeno 12. 2. 2013, iz <http://cnx.org/content/m38343/latest/?collection=col10699/latest> .
- [11] H. S. Kitzerow in C. Bahr, *Chirality in Liquid Crystals* (Springer, New York, 2001).
- [12] M. Kleman in O. D. Lavrentovich, *Soft Matter Physics: An Introduction* (Springer, New York, 2003).
- [13] M. Ambrožič, S. Kralj, S. Žumer, T. J. Sluckin in D. Svenšek, *Annihilation of Edge Dislocations in SmA Liquid Crystals*, Phys. Rev. E **70**, 51704 (2004).