



Univerza v Mariboru

---

Fakulteta za naravoslovje  
in matematiko

# **Analogija med topološkimi defekti v tekočih kristalih in osnovnimi delci**

**Diplomski seminar na študijskem programu 1. stopnje Fizika**

Filip Ferš

Mentor: red. prof. dr. Samo Kralj

Maribor, 2022

FERŠ, F.: Analogija med topološkimi defekti v tekočih kristalih in osnovnimi delci

Diplomski seminar, Univerza v Mariboru, Fakulteta za naravoslovje in matematiko, Oddelek za fiziko, 2022.

## POVZETEK

V diplomskem seminarju teoretično raziskujemo topološke defekte v nematskih tekočih kristalih in pokažemo, da so analogni osnovnim delcem. Uporabimo preprost mezoskopski model, kjer nematski red v dveh in treh dimenzijah opišemo s tenzorskim ureditvenim parametrom. Defekte topološko klasificiramo, predstavimo njihove lastnosti in raziščemo razliko med topološkimi defekti v dveh in treh dimenzijah. Ugotovimo da, v dveh dimenzijah obstaja neskončno mnogo, med seboj različnih točkovnih defektov, katerih skupni topološki naboj se pri seštevanju ohranja. V treh dimenzijah točkovni defekti lahko postanejo črtni defekti (disklinacije), za katere ne velja ohranitev topološkega naboja pri seštevanju defektov. Navzven nevtralne, zaključene disklinacije bi lahko predstavljale delec in antidelec, a v ravnem prostoru niso topološko stabilne. Energijo topoloških defektov izračunamo z uporabo modela deformacijske elastične energije in predstavimo način, kako topološke defekte stabiliziramo z ukrivljenostjo prostora.

Ključne besede: nematski tekoči kristali, osnovni delci, tenzorski ureditveni parameter, topološki defekti, topološki naboj, disklinacija, deformacijski model elastičnosti, ukrivljen prostor.

## ABSTRACT

In this seminar we theoretically study topological defects in nematic liquid crystals and show that they are analogous to elementary particles. We use a simple mesoscopic model, where the nematic order is described by a tensor order parameter in two and three dimensions. We topologically classify defects, describe their properties and investigate the influence of dimensionality on topological defects. We find that there are infinitely many different point defects in two dimensions, where topological charge is conserved when adding defects. In three dimensions, point defects can become line defects (disclinations), for which topological charge is not conserved. We also find that topologically neutral disclination loops, could represent particles and antiparticles, but are not topologically stable on a flat surface. We calculate the energy of defects using the elastic deformation energy model and describe mechanisms, which could stabilize topological defects in curved space.

Key words: nematic liquid crystals, elementary particles, tensor order parameter, topological defects, topological charge, disclination, elastic deformation model, curved space.

## Kazalo vsebine

<b>1 Uvod</b> .....	1
<b>2 Tekoči kristali</b> .....	4
<b>3 Topološki defekti</b> .....	6
<b>3.1 Topološki naboj</b> .....	7
<b>4 Elastična prosta energija v okolici defektov</b> .....	11
<b>5 Strukture v 2D in 3D nematskem direktorju</b> .....	15
<b>6 Stabilizacija črtnih topoloških defektov brez naboja s topologijo</b> .....	19
<b>7 Zaključek</b> .....	19
<b>Literatura in viri</b> .....	20

# 1 Uvod

Standardni model fizike osnovnih delcev je trenutno naše najboljše razumevanje osnovnih gradnikov vesolja in interakcij med njimi. Standardni model [1,2] (slika 1) razvršča osnovne delce glede na njihov spin, ki lahko zasede vrednosti 0, 1/2, ali 1, glede na naboj in glede na maso, ki je tipično podana v enotah energije  $\text{MeV}/c^2$ , kjer je  $c$  hitrost svetlobe v vakuumu, saj so mase osnovnih delcev zelo majhne. Osnovne delce [3] glede na spin razdelimo na dve družini. Osnovne delce s spinom 0 ali 1 imenujemo bozoni, osnovne delce s polovičnim spinom pa fermioni. Fermioni so delci, ki sestavljajo snov in jih delimo na kvarke in leptone. Kvarke so delci, ki imajo barvni naboj in lahko interagirajo z gluoni preko močne sile, leptoni pa barvnega naboja nimajo. Kvarke in leptone lahko interagirajo preko šibke in elektromagnetne sile. Kvarke in leptone lahko razdelimo v tri generacije, ki imajo enaka kvantna števila in različne mase. Masivnejše generacije so manj stabilne in razpadejo v lažje, ki sestavljajo snov. Za vsak delec pa obstaja tudi antidelec, ki ima nasprotni naboj. Delec in antidelec lahko anihilirata v par fotonov. Bozoni, ki tvorijo drugo družino osnovnih delcev, so nosilci sil. Interakcijo med dvema delcema si lahko predstavljamo kot izmenjavo bozona. Vsak bozon je nosilec specifične sile. Fotoni so nosilci elektromagnetne sile, gluoni so nosilci močne sile, bozoni W in Z pa so nosilci šibke sile. Delci morajo imeti določen naboj, da interagirajo preko določene sile. Delci potrebujejo za interakcijo preko elektromagnetne sile električni naboj, barvni naboj za interakcijo preko močne sile in šibek naboj za interakcijo preko šibke sile. Izmed bozonov izstopa Higgsov bozon, ki so ga odkrili leta 2012 v CERN-u. Higgsov bozon je edini znani osnovni delec, ki ima spinsko število 0. S Higgsovim delcem je povezano Higgsovo polje, ki daje maso vsem delcem, ki z njim interagirajo.

Kljub temu, da je standardni model eden izmed eksperimentalno najnatančnejše potrjenih modelov, vemo, da je nepopoln. Pojavi, ki jih standardni model ne pojasni, so gravitacijska sila, asimetrija med delci in antidelci, temna snov in temna energija, masa nevtrinov in oscilacije nevtrinov. Osredotočili se bomo na nevtrine, ki so nevtralni pod močno in elektromagnetno silo. Glede na standardni model naj ne bi imeli mase, vendar pa so z oscilacijami nevtrinov kljub temu eksperimentalno izmerili zgornjo mejo mase nevtrinov na 0,8 eV [4]. Nevtrini in antinevtrini nastanejo, ko proton v nestabilnem jedru razpade v nevtron in obratno. Pri tem procesu, ki ga imenujemo razpad beta, nastane delec beta (elektron) ali pa njegov antidelec (pozitron). Občasno v atomskem jedru razpadeta dva nevtrona in nastaneta dva protona (in obratno), pri čemer se izsevata dva delca beta, nastaneta pa tudi dva nevtrina ali antinevtrina. Eksperimenti kažejo [5], da pri takšnem razpadu, kjer bi naj nastala dva nevtrina, občasno ne nastane nobeden, kar pomeni, da bi nevtrino in antinevtrino lahko bila enak delec, oziroma je nevtrino sam svoj antidelec. Takšen delec je prvič predlagal italijanski fiziki Ettore Majorana, ko je opazil, da delce s spinskim številom  $-1/2$  lahko opišemo z valovno enačbo, ki je v celoti realna [6]. Ker je valovna funkcija delca kompleksno konjugirana funkcija njegove antidelca, bi ta delec lahko bil sam svoj antidelec, in ne bi imel naboja, v primeru, ko je valovna funkcija v celoti realna. Takšen delec imenujemo Majoranov fermion. Če so torej nevtrini Majoranovi fermioni, bi lahko razložili, zakaj je v vesolju

toliko več snovi kot antisnovi, saj bi pri breznevtrinskem razpadu beta dobili dva elektrona in posledično več snovi. Drug problem, ki bi ga lahko razložili, je masa nevtrinov, saj če so nevtrini Majoranovi fermioni, ne dobijo mase od Higgsovega mehanizma. Če bi izmerili pogostost breznevtrinskega razpada, bi posredno izmerili mase nevtrinov, saj je verjetnost anihilacije večja pri masivnejših delcih [5].

		FERMIONI			BOZONI	
		I	II	III		
KVARKI	Masa	$\approx 2.2 \text{ MeV}/c^2$ *	$\approx 1.28 \text{ GeV}/c^2$	$\approx 173.1 \text{ GeV}/c^2$	0	$\approx 124.97 \text{ GeV}/c^2$
	Naboj	$\frac{2}{3}$	$\frac{2}{3}$	$\frac{2}{3}$	0	0
	Spin	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	1	0
		<b>u</b> gor	<b>c</b> šarm	<b>t</b> vrh	<b>g</b> gluon	<b>H</b> higgs
		$\approx 4.7 \text{ MeV}/c^2$	$\approx 96 \text{ MeV}/c^2$	$\approx 4.18 \text{ GeV}/c^2$	0	
		$-\frac{1}{3}$	$-\frac{1}{3}$	$-\frac{1}{3}$	0	
	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	1		
	<b>d</b> dol	<b>s</b> čudnost	<b>b</b> dno	<b><math>\gamma</math></b> foton		
LEPTONI		$\approx 0.511 \text{ MeV}/c^2$	$\approx 105.66 \text{ MeV}/c^2$	$\approx 1.7768 \text{ GeV}/c^2$	0	$\approx 91.19 \text{ GeV}/c^2$
		-1	-1	-1	1	
		$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$		
		<b>e</b> elektron	<b><math>\mu</math></b> mion	<b><math>\tau</math></b> tauon	<b>Z</b> bozon Z	
	$< 1.0 \text{ eV}/c^2$	$< 0.17 \text{ MeV}/c^2$	$< 18.2 \text{ MeV}/c^2$	$\approx 80.433 \text{ GeV}/c^2$		
	0	0	0	$\pm 1$		
	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	1		
	<b><math>\nu_e</math></b> elektronski nevtrino	<b><math>\nu_\mu</math></b> mionski nevtrino	<b><math>\nu_\tau</math></b> tauonski nevtrino	<b>W</b> bozon W		
					* Vse mase so podane v $\text{MeV}/c^2$	

Slika 1. Standardni model fizike. Delci, ki sestavljajo snov, so fermioni, med katere spadajo kvarki in leptoni. Obstajajo tri generacije fermionov z različnimi masami. Vsak fermion ima svoj antidelec, s katerim lahko anihilira v par fotonov. Delci interagirajo med seboj z izmenjavo bozona. Povzeto po [37].

Eksperimentalne metode na področju osnovnih delcev so cenovno zelo neugodne, zato si želimo najti alternativo za preučevanje nevtrinov. V zadnjih časih raziskovalci na področju kvantne relativistične teorije polj menijo, da so osnovni gradniki narave polja in ne delci. Iz te perspektive osnovni delci predstavljajo stabilne lokalizirane vzbuditve v osnovnih poljih. Osnovne principe poljskega opisa narave sta vpeljala Faraday in Maxwell, kasneje pa je Skyrme predstavil teorijo, kjer je hadrone (delce, sestavljene iz kvarkov in bozonov, ki jih povezuje barvna sila) opisal kot topološke defekte v pionskem polju in jih poimenoval skirmioni [7]. Topološki defekti se pojavljajo v naravi na vseh velikostnih redih, od kozmologije do fizike osnovnih delcev, zaradi njihovega preprostega pogoja za nastanek: končna hitrost potovanja informacij in fazni prehod z nižanjem simetrije [8-10]. Topološki defekti so zanimivi, saj izkazujejo univerzalne lastnosti,

neodvisne od mikroskopskih lastnosti sistema, med drugim pa so lokalno topološko zaščiteni [11,12]. Če topološki defekti v osnovnih poljih vesolja predstavljajo osnovne delce, potrebujemo način, da jih preučujemo. Eden izmed takšnih eksperimentalnih poligonov so tekoči kristali [12-16]. To so materiali, ki imajo družino agregatnih stanj (faz) z delno urejenostjo. V tekočokristalnih fazah je urejenost večja kot v izotropnih tekočinah, ampak manjša kot v kristalu. Tekočokristalne faze imajo mehanske lastnosti tipičnih tekočin v tem, da tečejo in tvorijo kapljice, medtem ko so fizikalne lastnosti močno anizotropne (odvisne od smeri), kar je značilno za trdne kristale. Zaradi teh lastnosti so teočokristalne faze idealni poligon za preučevanje topoloških defektov, saj predstavljajo sistem, v katerem topološke defekte preprosto stabiliziramo in preučujemo. Tekoči kristali so pogosto sestavljeni iz podolgovatih organskih molekul. Ker nas ne zanima molekularna sestava tekočih kristalov, topološke defekte v tekočih kristalih modeliramo s preprostim mezoskopskim modelom, kjer si posamezne molekule predstavljamo kot pseudo vektorje. Enotski vektor, ki je vzporeden s preferenčno oz. povprečno smerjo lokalne ureditve dolgih osi molekul, imenujemo nematski direktor ( $\vec{n}$ ). Časovno in prostorsko spreminjanje nematskega direktorja opišemo s tenzorskim ureditvenim parametrom. Topološki defekti v nematskih tekočih kristalih so mesta, kjer direktorsko polje ni enolično določeno. Topološke defekte lahko klasificiramo s topologijo, ki se ukvarja z lastnostmi, ki se ohranjajo pri zveznih transformacijah. V zadnjih 60-ih letih je na področju topološke klasifikacije defektov v tekočih kristalih bilo narejenih veliko raziskav [11,17-29]. Ključno vlogo pri klasifikaciji ima topološki naboj, saj je stabilnost topoloških defektov zagotovljena zaradi ohranitve topološkega naboja pri zveznih deformacijah, če so robni pogoji fiksni. Da določimo topološki naboj, vpeljemo prostor ureditvenega parametra, ki ga sestavljajo vse možne realizacije ureditvenega parametra. Če je nematski direktor definiran v dveh dimenzijah (2D), imamo neskončno mnogo topoloških defektov, ki jih imenujemo točkovni defekti [20,27]. Topološki naboj v 2D je analogen spinskemu številu. Če pa je nematski direktor definiran v treh dimenzijah (3D), lahko imamo točkovne in črtne defekte (disklinacije), katerih naboj je analogen električnemu naboju [11,17,29]. V tekočih kristalih lahko imamo različne konfiguracije topoloških defektov, s katerimi je povezana elastična prosta energija, to je energija zaradi krajevnega spreminjanja smeri nematskega direktorja glede na nedeformirano stanje [11-14,30]. Ker strukture topoloških defektov, ki bi lahko imele vlogo Majoranovih fermionov, niso stabilne, saj topološki defekti med seboj lahko anihilirajo, potrebujemo način za stabilizacijo defektov. Ena možnost je ukrivljenost prostora [33-36], kjer najdemo strukture, na katerih so topološki defekti stabilni in bi lahko predstavljali Majoranove fermione. Ena izmed struktur, na kateri bi lahko stabilizirali dva naboja, ki predstavljata Majoranov fermion, je torus [23].

Cilj diplomske naloge je raziskati topološke defekte v nematskih tekočih kristalih, jih topološko klasificirati, pregledati geometrijske strukture, ki nastanejo kot posledica topoloških defektov, določiti energijo topoloških defektov in predlagati način stabilizacije topoloških defektov v konfiguraciji, ki bi lahko bila analogna nevtrinom.

V diplomski nalogi najprej predstavimo tekoče kristale in njihove lastnosti ter vpeljemo matematično orodje, s katerim opišemo orientacijski red v nematikih (poglavje 2). V poglavju 3 predstavimo topološke defekte in jih topološko klasificiramo tako, da vpeljemo prostor ureditvenega parametra in jim pripišemo topološki naboj. Topološki naboj določimo za defekte v dveh ali treh dimenzijah nematskega direktorja ter opišemo lastnosti topoloških defektov in topološkega naboja (poglavje 3.1). Nato vpeljemo gostoto proste energije povezane s spremembo tenzorskega ureditvenega parametra, da določimo elastično prosto energijo topoloških defektov v 2D (poglavje 4). V nadaljevanju predstavimo razliko med geometrijskimi strukturami v različnih dimenzijah polja nematskega direktorja (poglavje 5). Na koncu predstavimo način stabilizacije topoloških defektov (poglavje 6).

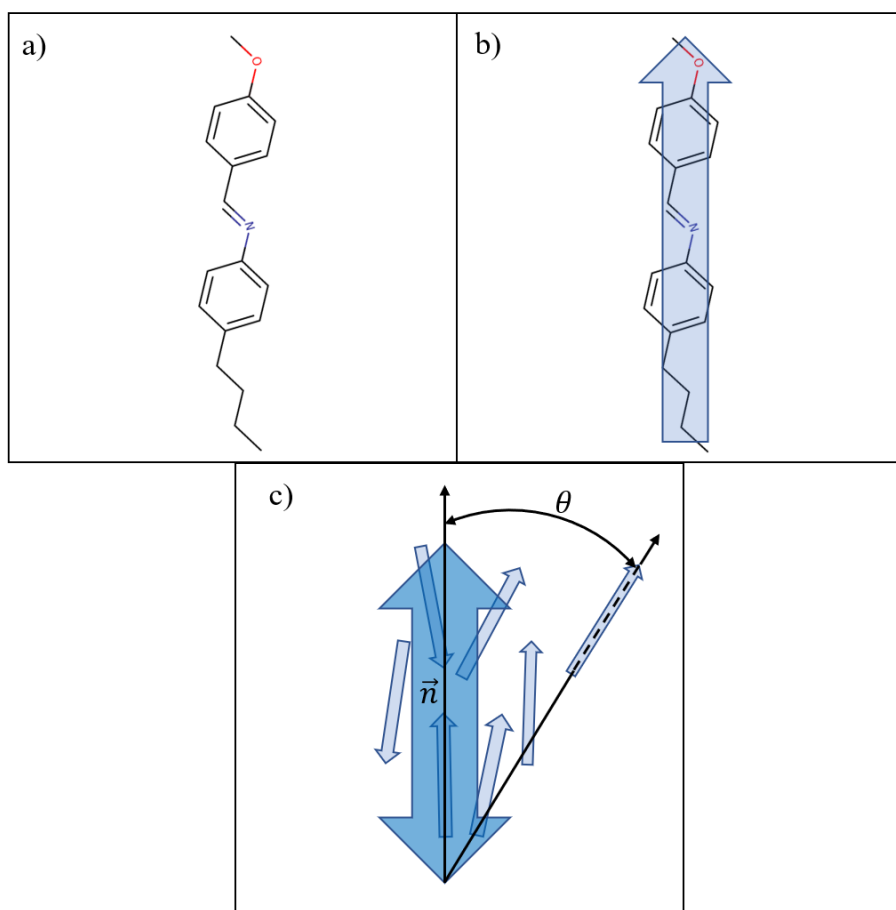
## 2 Tekoči kristali

Tekoči kristali so zelo pogosti v našem vsakdanjem življenju, najdemo jih predvsem v tekočokristalnih zaslonih, niso pa zanimivi samo s tehnološkega vidika, temveč tudi kot orodje za preučevanje zelo univerzalnih pojavov. Tekoče kristale lahko delimo na termotropne in liotropne glede na to ali je njihovo fazno obnašanje odvisno od temperature ali od razmerja koncentracij topila in topljenca. V živih organizmih so večjega pomena liotropni tekoči kristali, v tehnologiji pa so pogostejši termotropni tekoči kristali. Termotropne tekočokristalne faze lahko ločimo glede na translacijski in orientacijski red teh faz. Pri visokih temperaturah so dolge osi anizotropnih molekul naključno orientirane in njihova težišča naključno porazdeljena. To je izotropna tekočina. Pri neki temperaturi pride do faznega prehoda v tekočo kristalno fazo, t.i. nematsko fazo, kjer so dolge osi molekul lokalno orientacijsko poravnane, še vedno pa so težišča molekul naključno porazdeljena. V diplomskem seminarju se bomo omejili na nematsko fazo, kjer si posamezne molekule predstavljamo kot pseudo vektorje (slika 2b), saj nas, kot že omenjeno, ne zanima molekularna struktura tekočih kristalov. Za nematsko fazo je značilen orientacijski red dolgega dosega, kjer so daljše osi molekul orientacijsko poravnane v neki preferenčni smeri, ki se v snovi lahko lokalno spreminja. Enotski vektor, ki je vzporeden s preferenčno oz. povprečno smerjo lokalne ureditve dolgih osi molekul, imenujemo nematski direktor ( $\vec{n}$ ) (slika 2c). Za nematski direktor je značilno, da je sta smeri  $\vec{n}$  in  $-\vec{n}$  ekvivalentni ( $-\vec{n} \equiv \vec{n}$ ), saj v tipičnih nematikih ni razlike med glavo in repom molekul. Kot posledico enakovrednosti smeri nematskega direktorja orientacijsko urejenost dolgih osi molekul opišemo s tenzorjem drugega reda, t.i. tenzorskim ureditvenim parametrom nematske faze z delnim nematskim redom v katerikoli smeri  $\vec{n}$  [8-11], ki ga zapišemo kot:

$$Q_{\alpha\beta} = S \left( \frac{3}{2} n_{\alpha} n_{\beta} - \frac{1}{2} \delta_{\alpha\beta} \right), \quad (1)$$

kjer je  $n_{\alpha}$  komponenta  $\alpha$  nematskega direktorja  $\vec{n}$ .  $S$  je skalarni orientacijski ureditveni parameter, ki nam pove velikost stopnje urejenosti dolgih osi molekul in ga zapišemo kot  $S = 1/2 \langle 3 \cos^2 \theta - 1 \rangle$ , v katerem je  $P_2(\cos \theta) = 1/2(3 \cos^2 \theta - 1)$  Legendrov polinom

drugega reda,  $\langle \dots \rangle$  predstavlja povprečje po vseh orientacijah dolgih osi molekul,  $\theta$  pa je kot med smerjo dolge osi molekule in smerjo nematskega direktorja. Drug del izraza v oklepaju v enačbi (1) podaja informacijo o smeri nematskega direktorja, kjer sta  $\alpha = x, y, z$  in  $\beta = x, y, z$  komponenti nematskega direktorja in  $\delta_{\alpha\beta}$  je enotski tenzor. Vrednosti, ki jih lahko parameter  $S$  zasede, so med  $S \in [-1/2, 1]$ . V primeru, ko je  $S = 1$ , imamo popoln nematski red. Tedaj je  $\theta = 0$  in so dolge osi vseh molekul vzporedne. Če je  $S = 0$ , nimamo nematskega reda in smo v izotropni fazi. Mesta, kjer je vrednost ureditvenega parametra v nematski fazi enaka nič, imenujemo defekti. Tipično imamo opravka z delnim nematskim redom, kjer je  $0 < S < 1$ , lahko pa skalarni ureditveni parameter zasede tudi negativno vrednost  $-1/2 < S < 0$ . V primeru negativnega nematskega reda, direktor  $\vec{n}$  opisuje smer, od katere so dolge osi molekul odbite.



Slika 2. a) Tekočekristalne faze so tipično sestavljene iz podolgovatih organskih molekul. b) Posamezne molekule si predstavljamo kot pseudo vektorje. c) Nematski direktor ( $\vec{n}$ ) kaže v smeri povprečne ureditve dolgih osi molekul znotraj nekega manjšega volumna. Kot med smerjo dolge osi molekule in smerjo nematskega direktorja je  $\theta$ . Prirejeno po [39].



### 3 Topološki defekti

Topološki defekti so zelo pogosti zaradi preprostega pogoja za njihov nastanek na različnih velikostnih redih, pojavljajo se v kozmologiji, fiziki osnovnih delcev in fiziki trdne snovi. Pogoj za nastanek topoloških defektov je spontani zlom simetrije v fizikalnem polju. Standardni model fizike je zgrajen na domisleku spontano zlomljene notranje simetrije, saj bi drugače bili bozoni brez mase. Glede na teorijo velikega poenotenja je pri razširjanju in posledično hlajenju zgodnjega vesolja tik za velikim pokom pri določenih temperaturah prišlo do faznih prehodov in posledično do zlomov simetrije, kjer se je simetrija sistema zmanjšala. Stanje sistema lahko predstavimo z energijskim potencialom, ki ima obliko mehiškega klobuka (Higgsov potencial). Higgsov potencial predstavlja mehanizem, preko katerega osnovni delci dobijo maso, ko interagirajo s Higgsovim poljem. Pred faznim prehodom se nahajamo na sredini tega klobuka, kjer so vse smeri enakovredne, po spontanem zlomu simetrije pa se znajdemo v robu potenciala, kjer smeri niso več enakovredne. Ko se sistemu zniža simetrija, ima več možnih ekvivalentnih osnovnih stanj, kjer več različnih delov vakuuma lahko naključno izbere različna osnovna stanja, ker so enakovredna, in pri tem zaradi končne hitrosti potovanja informacij nastanejo domene. Ko se takšen sistem razvija skozi fazni prehod, se domene večajo in srečajo. Točke, kjer se različne domene stikajo, so območja visoke gostote energije oziroma topološki defekti. Takšno tvorbo defektov imenujemo Kibble-Zurkov mehanizem, ki pravi, da lahko topološki defekti nastanejo, kot smo že povedali, na kakršnem koli velikostnem redu, če sta izpolnjena dva pogoja: končna hitrost potovanja informacij in fazni prehod z nižanjem simetrije. Glede na Kibble-Zurkov mehanizem je gostota defektov inverzno sorazmerna s časom po prehodu. Topološki defekti izkazujejo univerzalne lastnosti, ki so neodvisne od mikroskopskih lastnosti sistema, zato so sistemi, kjer lahko topološke defekte ustvarimo, stabiliziramo in opazujemo zelo zanimivi. Eden takšnih sistemov so tekoči kristali, kjer dovolj hitri fazni prehodi iz izotropne v nematsko, fazo pri čemer se zlomi simetrija, zagotovijo topološke defekte zaradi Kibble-Zurkovega mehanizma. Zaradi preprostosti se bomo omejili samo na nematsko fazo, v kateri lahko najdemo vse tipe topoloških defektov pod pravimi pogoji (točkasti defekti, črtni defekti, vzorci in domenske stene).

Da določimo topološki naboj, vpeljemo prostor ureditvenega parametra, ki ga sestavljajo vse možne realizacije ureditvenega parametra določenega z enačbo (1) [14]. Če imamo grupo zveznih rotacij v 3D, ki je del evklidske grupe, katere termodinamično stanje je invariantno na rotacijo in translacijo, lahko takšno 3D rotacijo opišemo z vektorjem  $\vec{k}$ , ki je vzporeden z osjo rotacije in ima velikost enako kotu rotacije  $\varphi$ . Rotacije vektorja  $\vec{k}$  okoli vseh možnih osi z eno skupno točko sestavljajo grupo vseh pravih rotacij v 3D evklidskem prostoru. To grupo predstavlja 3D krogla z radijem  $\pi$ , ki jo označimo z  $SO(3)$ , in jo sestavljajo točke  $\varphi\vec{k}/|\vec{k}|$ , kjer je  $-\pi \leq \varphi \leq \pi$ . Ker so vse rotacije nematskega direktorja  $\vec{n}$  v  $SO(3)$  enakovredna stanja, se grupa  $SO(3)$  poenostavi iz krogle na sfero  $S^2$ , ki se dodatno faktorizira iz polne sfere na polovično sfero, saj sta stanji  $\vec{n}$  in  $-\vec{n}$  ekvivalentni. To se imenuje faktorizacija grupe  $SO(3)$  z grupo  $SO(2)$ .

Ureditveni parameter nematskega direktorja je tedaj  $\mathcal{R} = SO(3)/(SO(2) \times Z_2)$ , kar se tudi imenuje realna projektivna ravnina  $\mathbb{R}P^2$ , kjer je  $Z_2$  grupa števil 0 in 1, za katero velja  $0 + 0 = 1, 0 + 1 = 1, 1 + 0 = 1, 1 + 1 = 0$ , in kjer simbol  $\times$  predstavlja direkten produkt dveh grup. Če je nematski direktor definiran v 2D, je prostor vseh možnih orientacij direktorja polkrog  $S^1/Z_2$  in točkovne topološke defekte lahko opišemo kot zanke v tem prostoru ureditvenega parametra, ki jih klasificira fundamentalna grupa  $\pi_1(S^1/Z_2) = Z$ , ki ima neskončno mnogo elementov in posledično tudi neskončno mnogo tipov točkovnih defektov. Vsak tip točkovnega defekta v 2D, karakterizira topološki naboj, ki lahko zasede celoštevilčne ali polovične vrednosti (ker velja  $\vec{n} \equiv -\vec{n}$ ). V primeru 3D nematskega direktorja pa je prostor vseh možnih orientacij nematskega direktorja polobla  $S^2/Z_2$ . V tem primeru disklinacije lahko opišemo kot zanke v tem prostoru ureditvenega parametra, ki jih klasificira fundamentalna grupa  $\pi_1(S^2/Z_2) = Z_2$ . Ta fundamentalna grupa ima samo dva elementa, ki predstavljata brezdefektno stanje, in en tip disklinacije s polovičnim topološkim nabojem, saj so disklinacije s celoštevilčnim topološkim nabojem, topološko nestabilne. Točkovne defekte v 3D pa klasificira fundamentalna grupa  $\pi_2(S^2/Z_2) = Z$ , ki ima neskončno mnogo elementov.

### 3.1 Topološki naboj

Topološki naboj ( $q^{(d)}$ ) topološkega defekta v  $d$ -dimenzionalnem koordinatnem sistemu  $\{\vec{e}_1, \vec{e}_2, \dots, \vec{e}_d\}$  v vektorskem polju  $\vec{n} = n_1\vec{e}_1 + n_2\vec{e}_2 + \dots + n_d\vec{e}_d$ , kjer je  $|\vec{n}| = 1$ , je definiran kot integral po površini, ki obdaja defekt:

$$q^{(d)} = \frac{1}{\Omega} \iint \dots \int \text{Det} \begin{vmatrix} n_1 & n_2 & \dots & n_d \\ \frac{\partial n_1}{\partial u_1} & \frac{\partial n_2}{\partial u_1} & \dots & \frac{\partial n_d}{\partial u_1} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial n_1}{\partial u_{d-1}} & \frac{\partial n_d}{\partial u_{d-1}} & \dots & \frac{\partial n_d}{\partial u_{d-1}} \end{vmatrix} du_1 du_2 \dots du_{d-1}. \quad (2)$$

Koordinate  $\{u_1, u_2, \dots, u_{d-1}\}$  določajo  $d - 1$  dimenzionalno površino, ki obdaja defekt,  $\Omega$  pa je prostorski kot v  $d$ -dimenzionalnem prostoru. V 2D je  $\Omega = 2\pi$  in v 3D je  $\Omega = 4\pi$ . Integral v enačbi (2) nam pove, kolikokrat so bile realizirane vse možne konfiguracije prostora ureditvenega parametra znotraj obdanega prostora [20]. V primeru 2D nematskega direktorja lahko uporabimo parametrizacijo  $\vec{n} = n_1\vec{e}_1 + n_2\vec{e}_2$ , kjer je  $n_1 = \cos \theta$  in  $n_2 = \sin \theta$ . Nematski direktor zapišemo kot:

$$\vec{n}(x, y) = (\cos \theta(x, y), \sin \theta(x, y)). \quad (3)$$

Topološki naboj za 2D nematski direktor izračunamo po enačbi (2) kot:

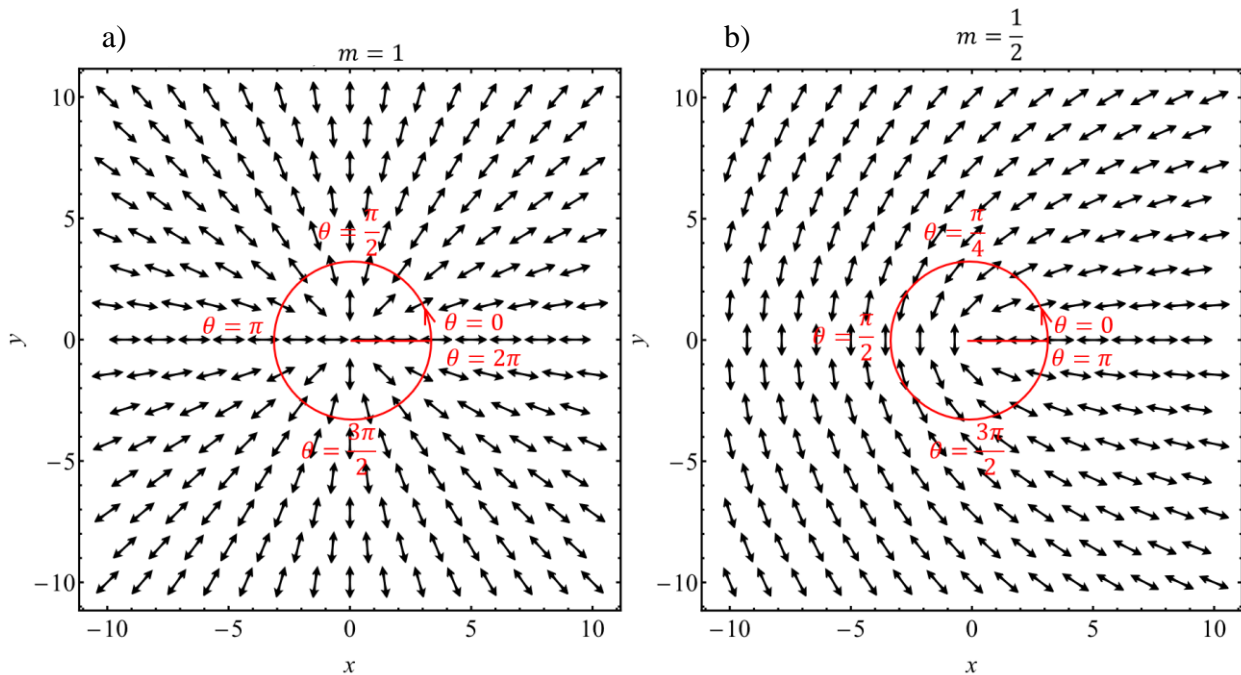
$$q^{(2)} \equiv m = \frac{1}{2\pi} \int \text{Det} \begin{vmatrix} n_1 & n_2 \\ \frac{\partial n_1}{\partial u} & \frac{\partial n_2}{\partial u} \end{vmatrix} du, \quad (4)$$

kjer je  $du$  diferencialno majhen premik v smeri proti urinem kazalcu po zaključeni zanki, ki obkroža defekt,  $m$  pa je navojno število. Če enačbo (3) vstavimo v enačbo (4), dobimo:

$$m = \frac{1}{2\pi} \oint d\theta = \frac{\Delta\theta}{2\pi}, \quad (5)$$

kjer je  $\Delta\theta$  sprememba kota smeri nematskega direktorja. Navojno število nam pove, kolikokrat se nematski direktor zavrti okoli jedra defekta, ko se po zaključeni zanki, ki obdaja defekt, pomaknemo nazaj v isto točko. Navojna števila topoloških defektov v 2D (točkovni defekti) lahko imajo celoštevilčne vrednosti  $m \in \{\pm 1, \pm 2, \dots\}$  in ker za nematski direktor velja  $-\vec{n} \equiv \vec{n}$ , lahko navojno število zasede tudi polovične vrednosti  $m \in \{\pm 1/2, \pm 1, \pm 3/2, \pm 2, \pm 5/2, \dots\}$ .

Primer topološkega defekta s topološkim nabojem  $m = 1$  je prikazan na sliki 3a, kjer nematski direktor oklepa nek kot ( $\theta$ ) z osjo  $x$ . Če začnemo pri kotu  $\theta = 0$  in končamo pri kotu  $\theta = 2\pi$ , upoštevamo, da je  $\Delta\theta = 2\pi$  zato je  $m = 1$ . Na enak način za topološki defekt, prikazan na sliki 3b ugotovimo, da je  $\Delta\theta = \pi$  in  $m = 1/2$ .



Slika 3. Navojno število ( $m$ ) pove, kolikokrat se je nematski direktor zavrtel okoli jedra defekta, ko smo se premaknili okoli defekta po zaključeni zanki v smeri proti urinem kazalcu. Defekt z navojnim številom a)  $m = 1$  in b)  $m = 1/2$ .  $\theta$  je kot med smerjo nematskega nematskega direktorja in  $x$  osjo.

Topološki defekti v 2D nematskem direktorskem polju lahko imajo neskončno mnogo točkovnih defektov, ki med seboj niso ekvivalentni. V kolikor pa je nematski direktor definiran v 3D, ti točkovni defekti lahko postanejo disklinacije. V 3D nematskem direktorskem polju obstaja samo en tip disklinacij, saj so vsi topološki defekti s polovičnim nabojem topološko ekvivalentni med seboj in lahko zvezno prehajajo eden v drugega. Disklinacije s celoštevilčnim nabojem pa so ekvivalentne brezdefektnemu stanju. Disklinaciji lahko določimo topološki naboj, če je sklenjena. Drug tip defektov v 3D nematskem direktorju, so 3D točkovni defekti (ježasti defekt). Topološki naboj v 3D izračunamo kot:

$$q^{(3)} = \frac{1}{4\pi} \oint \vec{n} \cdot \left[ \frac{\partial \vec{n}}{\partial u} \times \frac{\partial \vec{n}}{\partial v} \right] du dv . \quad (6)$$

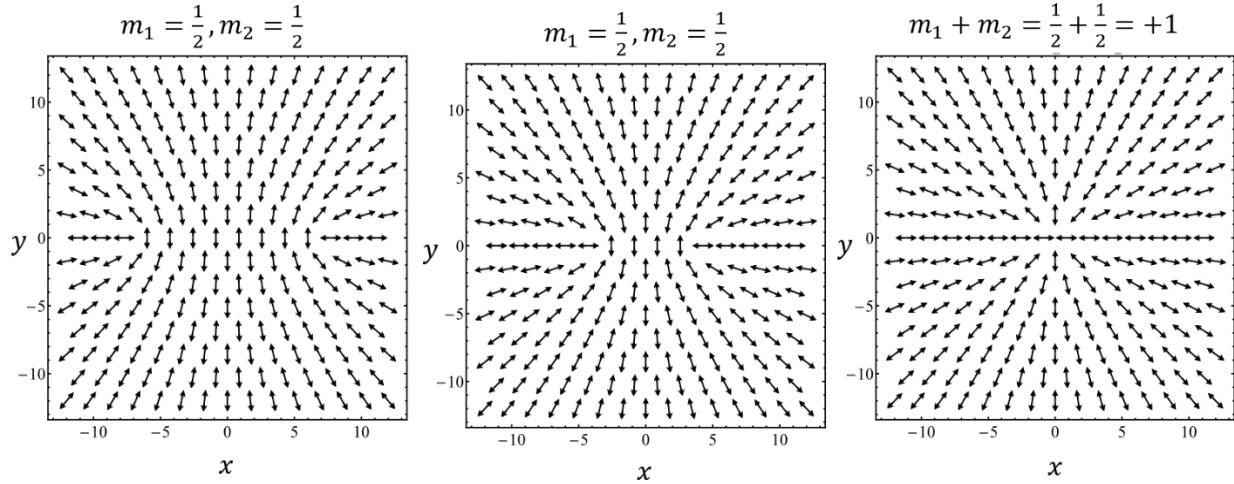
Če uporabimo parametrizacijo za 3D nematski direktor  $\vec{n} = n_1 \vec{e}_1 + n_2 \vec{e}_2 + n_3 \vec{e}_3$ , kjer je  $n_1 = \sin \theta \cos \varphi$ ,  $n_2 = \sin \theta \sin \varphi$ ,  $n_3 = \cos \theta$ ,  $\theta$  je polarni kot in  $\varphi$  azimutni kot, potem je topološki naboj:

$$q^{(3)} = \frac{1}{4\pi} \oint \left( \frac{\partial \theta}{\partial u} \frac{\partial \varphi}{\partial v} - \frac{\partial \theta}{\partial v} \frac{\partial \varphi}{\partial u} \right) \sin \theta du dv . \quad (7)$$

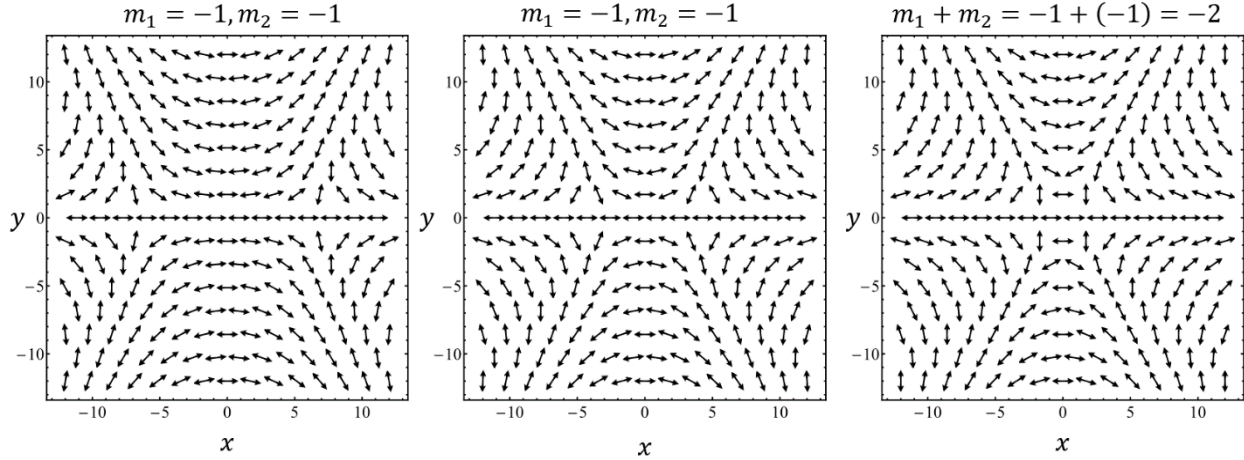
Zaključeno disklinacijo od daleč lahko vidimo kot točkast naboj v primeru, da je topološki naboj celotne konfiguracije različen od nič ( $q^{(3)} \neq 0$ ), če pa je topološki naboj te konfiguracije enak nič ( $q^{(3)} = 0$ ), disklinacija ni topološko stabilna v ravnem prostoru. V primeru, da direktor kaže v radialni smeri (ježasti defekt), izračunamo topološki naboj kot:

$$q^{(3)} = \frac{1}{4\pi} \oint \sin \theta du dv = 1 , \quad (8)$$

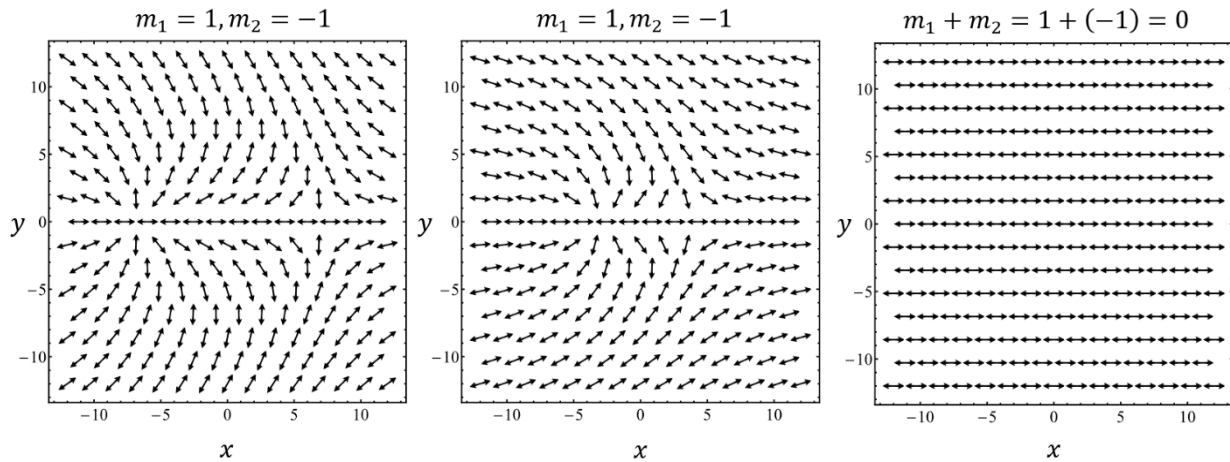
kjer je zaradi ekvivalentnosti nematskega direktorja ( $\vec{n} \equiv -\vec{n}$ ) topološki naboj ježastega defekta lahko tudi negativen ( $q^{(3)} = \pm 1$ ). Število  $q^{(3)}$  nam pove število vseh realiziranih orientacij vektorskega polja na celotni površini, ki obdaja defekt. Razlikujemo med radialnimi ježastimi defekti  $q^{(3)} = +1$  (radial hedgehog) in hiperboličnimi ježastimi defekti  $q^{(3)} = -1$  (hyperbolic hedgehog) [20]. 2D in 3D topološki naboji se razlikujejo v tem, da v 3D ne velja ohranitev naboja pri seštevanju topoloških defektov. Ohranitev naboja pri seštevanju velja v 2D. Na slikah 4 in 5 sta prikazana primera, kjer se dva topološka defekta z enakim pozitivnim ali negativnim polovičnim nabojem ( $\pm 1/2, \pm 1/2$ ) seštejeta v samostojen defekt s pozitivnim ali negativnim topološkim nabojem ( $\pm 1$ ), dva enaka celoštevilčna naboja se seštejeta v defekt z večjim navojnim številom, dva defekta z nasprotnim polovičnim ali celoštevilčnim nabojem pa anihilirata (slika 6).



Slika 4. Defekte v 2D lahko seštevamo. Dva defekta s topološkim nabojem  $m_{1,2} = +1/2$  se približujeta in seštejeta v en defekt s topološkim nabojem  $m = 1$ .



Slika 5. Defekte lahko seštevamo. Dva defekta s topološkim nabojem  $m_{1,2} = -1$  se približujeta in seštejeta v defekt s topološkim nabojem  $m = -2$ .



Slika 6. Defekte v 2D lahko seštevamo. Dva defekta s topološkim nabojem  $m_1 = -1, m_2 = +1$  se približujeta in med seboj anihilirata oz. se seštejeta v stanje z  $m = 0$ , kar predstavlja brezdefektno stanje nematskega direktorja.

## 4 Elastična prosta energija v okolici defektov

Gostoto proste energije, povezane s spremembo tenzorskega ureditvenega parametra v okolici faznega prehoda med nematsko in izotropno fazo, opisuje Landauova teorija faznih prehodov, kjer gostoto kondenzacijske proste energije ( $f_c$ ) razvijemo kot funkcijo ureditvenega parametra v okolici faznega prehoda, pri katerem se skalarni ureditveni parameter ( $S$ ) spremeni nezvezno iz  $S = 0$  v izotropni fazi v končno vrednost  $S \neq 0$  v nematski fazi. Za opis tega obnašanja je potreben razvoj po tenzorskem ureditvenem parametru do četrtega reda:

$$f_c = \frac{1}{2}A \text{Tr}Q^2 + \frac{1}{3}B \text{Tr}Q^3 + \frac{1}{4}C(\text{Tr}Q^2)^2, \quad (9)$$

kjer so  $A, B, C$  razvojni koeficienti, ki so odvisni od snovi. Koeficient  $A$  je odvisen od temperature in opisuje fazni prehod med nematsko in izotropno fazo.  $\text{Tr}$  predstavlja sled tenzorja. Gostota kondenzacijske proste energije ne opisuje prostorskega spreminjanja nematskega direktorja, zato skupno gostoto proste energije ( $f$ ) sestavimo iz kombinacije kondenzacijskega prispevka in gostote elastične proste energije ( $f_e$ ):

$$f = f_c + f_e. \quad (10)$$

Na nekem mestu v tekočem kristalu ima direktor preferenčno smer. Preferenčna smer se lahko spreminja s krajem zaradi zunanjimi sil ali robnih pogojev. Če so odmiki smeri direktorja  $\vec{n}$  iz ravnovesne lege majhni in je sprememba smeri nematskega direktorja na razdalji molekularne dolžine majhna, lahko odziv tekočega kristala opišemo s kontinuumsko teorijo elastičnosti. V primerjavi s homogenim poljem nematskega direktorja ima nehomogeno polje nematskega direktorja višjo energijo. Razlika je podana z elastično prosto energijo, ki je odvisna od gradienta tenzorskega ureditvenega parametra. Če so deformacije v smeri nematskega direktorja majhne, je dober približek, da je skalarni ureditveni parameter približno konstanten ( $S = \textit{konst.}$ ), in tedaj lahko gostoto proste energije deformiranega stanja zapišemo kot:

$$f_e = f_0 + f_d, \quad (11)$$

kjer je  $f_0$  gostota proste energije v ravnovesju,  $f_d$  pa je deformacijska gostota proste energije. Splošna oblika gostote deformacijske proste energije je:

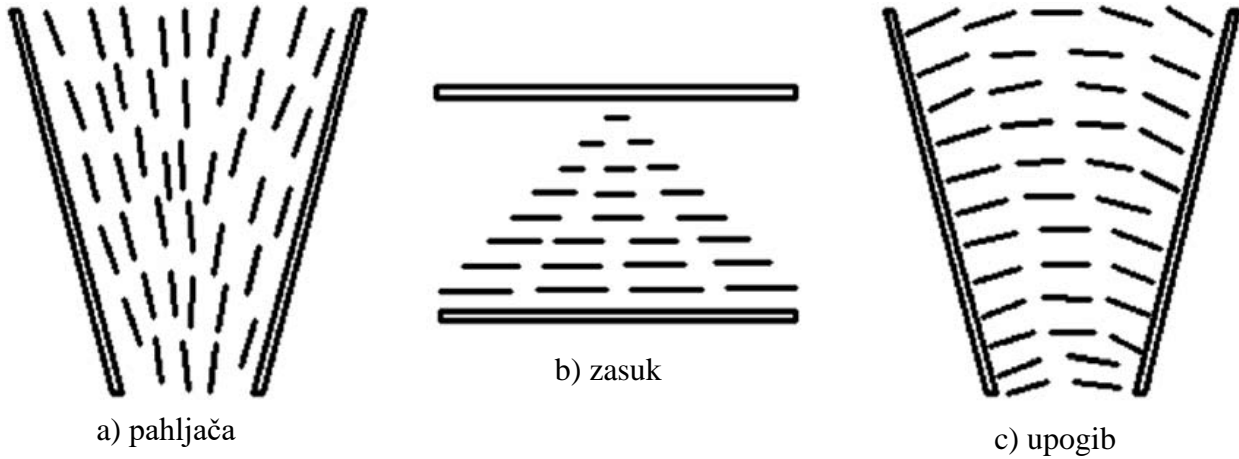
$$f_d = \frac{1}{2}K_{11}|\overline{Sp}|^2 + \frac{1}{2}K_{22}T^2 + \frac{1}{2}K_{33}|\overline{B}|^2 - K_{24}\overline{V} \cdot [\overline{Sp} + \overline{B}], \quad (12)$$

kjer štirje členi predstavljajo štiri vrste deformacij nematskega direktorja, katerih uteži so elastične konstante, in sicer  $K_{11}$  za pahljačasto deformacijo ( $\overline{Sp}$ ),  $K_{22}$  za zasuk ( $T$ ),  $K_{33}$  za upogib ( $\overline{B}$ ) in  $K_{24}$  za vpliv površine. Elastične konstante povedo, koliko gostote proste energije je povezane z določeno deformacijo nematskega direktorja. Upogib  $\overline{B} = \vec{n} \times (\overline{V} \times \vec{n})$  predstavlja deformacijo

vzdolž osi, ki je pravokotna na os nematskega direktorja (slika 7c). Zasuk  $T = \vec{n} \cdot (\vec{\nabla} \times \vec{n})$  predstavlja spreminjanje smeri direktorja, kjer se nematski direktor suče okoli neke osi (slika 7b). Pri pahljačasti deformaciji  $\overline{Sp} = (\vec{\nabla} \cdot \vec{n})\vec{n}$  pa se direktorsko polje nagiba vstran od centralne osi (slika 7a). Deformacijsko prosto energijo ( $F_d$ ) lahko zapišemo kot integral po celotnem volumnu  $D$ -dimenzionalnega direktorja tekočega kristala kot:

$$F_d = \int f_d d^D r, \quad (13)$$

kjer je  $D = 3$  v 3D ali  $D = 2$  v 2D.



Slika 7. Tri vrste osnovnih deformacij nematskega direktorja: a) pahljačasta, b) zvojna in c) upogibna. Povzeto po [39].

V 3. poglavju smo karakterizirali 2D defekte s topološkim nabojem, ki pove, kolikokrat se direktor zavrti, ko gremo po zaključeni zanki okoli jedra defekta, sedaj pa nas zanima energija povezana z defekti. Najpreprostejši primer deformacijske proste energije topoloških defektov je za 2D nematski direktor. Če vstavimo enačbo (3), ki določa 2D nematski direktor, v najpreprostejšo obliko deformacijske proste energije (enačba (13)) in uporabimo približek, da so vse elastične konstante enake ( $K$ ), dobimo prosto energijo samo v odvisnosti od kota  $\theta$ . Deformacijsko prosto energijo v tem primeru zapišemo kot:

$$F = \int d^2 r \frac{1}{2} K (\partial_\alpha n_\beta) (\partial_\alpha n_\beta), \quad (14)$$

kjer se da pokazati, da tenzor  $\partial_i n_j$  lahko razstavimo na osnovne elastične deformacije ( $\overline{Sp}, T, \vec{B}$  in člen, ki predstavlja vpliv površine). V našem primeru za 2D direktor velja, da je  $(\partial_\alpha n_\beta) (\partial_\alpha n_\beta) = (\partial_x n_x)^2 + (\partial_x n_y)^2 + (\partial_y n_x)^2 + (\partial_y n_y)^2$  in deformacijska prosta energija (enačba (14)) se nato poenostavi v:

$$F = \int d^2r \frac{1}{2} K \left( \left( \frac{\partial \theta}{\partial x} \right)^2 + \left( \frac{\partial \theta}{\partial y} \right)^2 \right), \quad (15)$$

kar lahko zapišemo z gradientom kota  $\theta$  kot:

$$F = \int d^2r \frac{1}{2} K |\vec{\nabla} \theta|^2. \quad (16)$$

Z minimizacijo proste energije (enačba (16)), dobimo krajevno odvisnost kota  $\theta(x, y)$ . Za stanje lokalnega minimuma velja:

$$\frac{\delta F}{\delta \theta(x, y)} = 0. \quad (17)$$

Iz enačbe (15) sledi:

$$\frac{\delta F}{\delta \theta(x, y)} = K \left( -\frac{\partial^2 \theta}{\partial x^2} - \frac{\partial^2 \theta}{\partial y^2} \right). \quad (18)$$

Izraz na desni strani enačbe (18) je enak  $-K \nabla^2 \theta$ . Ko združimo enačbi (17) in (18), dobimo, da je prosta energija je minimalna, ko je izpolnjen pogoj:

$$\nabla^2 \theta = 0. \quad (19)$$

Enačbo (19) imenujemo Euler-Lagrangeeva enačba, katere rešitev je krajevno polje nematskega direktorja, ki predstavlja lokalni minimum energije. Konfiguracije nematskega direktorja (slika 8), ki predstavljajo točkovne defekte v polarnih koordinatah, so tedaj [11]:

$$\theta = q^{(2)} \varphi + \theta_0, \quad (20)$$

kjer je  $q^{(2)} \equiv m$  navojno število v 2D,  $\varphi = \tan^{-1} \frac{y}{x}$  in  $\theta_0$  konstanta. Nematske konfiguracije v ravnovesju predstavljajo primeri, ko je navojno število  $m = 0$ . Različne vrednosti konstante  $\theta_0$  določajo različna ravnovesna osnovna stanja. Skupina vseh možnih konfiguracij predstavlja prostor ureditvenega parametra.

Deformacijsko prosto energijo izračunamo po enačbi (16), kjer uporabimo polarne koordinate  $\{r, \varphi\}$ , pri katerih za gradient kota velja zveza:

$$\vec{\nabla} \theta = \frac{\partial \theta}{\partial r} \hat{r} + \frac{1}{r} \left( \frac{\partial \theta}{\partial \varphi} \right) \hat{\varphi}. \quad (21)$$

Če v enačbo (21) vstavimo enačbo (20), in dobljeni izraz kvadiramo, lahko izračunamo deformacijsko prosto energijo ( $F$ ) po enačbi (16) v polarnih koordinatah kot:



$$F = \int_0^{\infty} r dr \int_0^{2\pi} d\varphi \left( \frac{Km^2}{2r^2} \right). \quad (22)$$

Če izraz na desni strani enačbe (22) integriramo, dobimo logaritem oddaljenosti  $r$  od središča defekta v mejah med 0 in  $\infty$ , kar ni fizikalno smiselno. V spodnji meji imamo problem, imenovan ultravijolična divergenca (problem majhne razdalje), zato moramo uporabiti deformacijsko teorijo na razdaljah ( $r$ ), ki so večje od jedra defekta ( $r_{jedro}$ ). Ker smo se omejili na  $r > r_{jedro}$ , moramo k energiji dodati člen energije jedra defekta ( $F_{jedro}$ ). V zgornji meji integrala imamo problem infrardeče divergence (problem velike razdalje), kar je teoretično smiselno, saj direktor ni deformiran samo v centru, ampak se vpliv pozna na okoliškem polju ravno dovolj, da integral lahko divergira, zato se fizikalno omejimo na največjo velikost dosega ( $R_{max}$ ). Tedaj lahko integral z novimi mejami zapišemo kot:

$$F = \pi K q^2 \int_{r_{jedro}}^{R_{max}} \frac{dr}{r} + F_{jedro}, \quad (23)$$

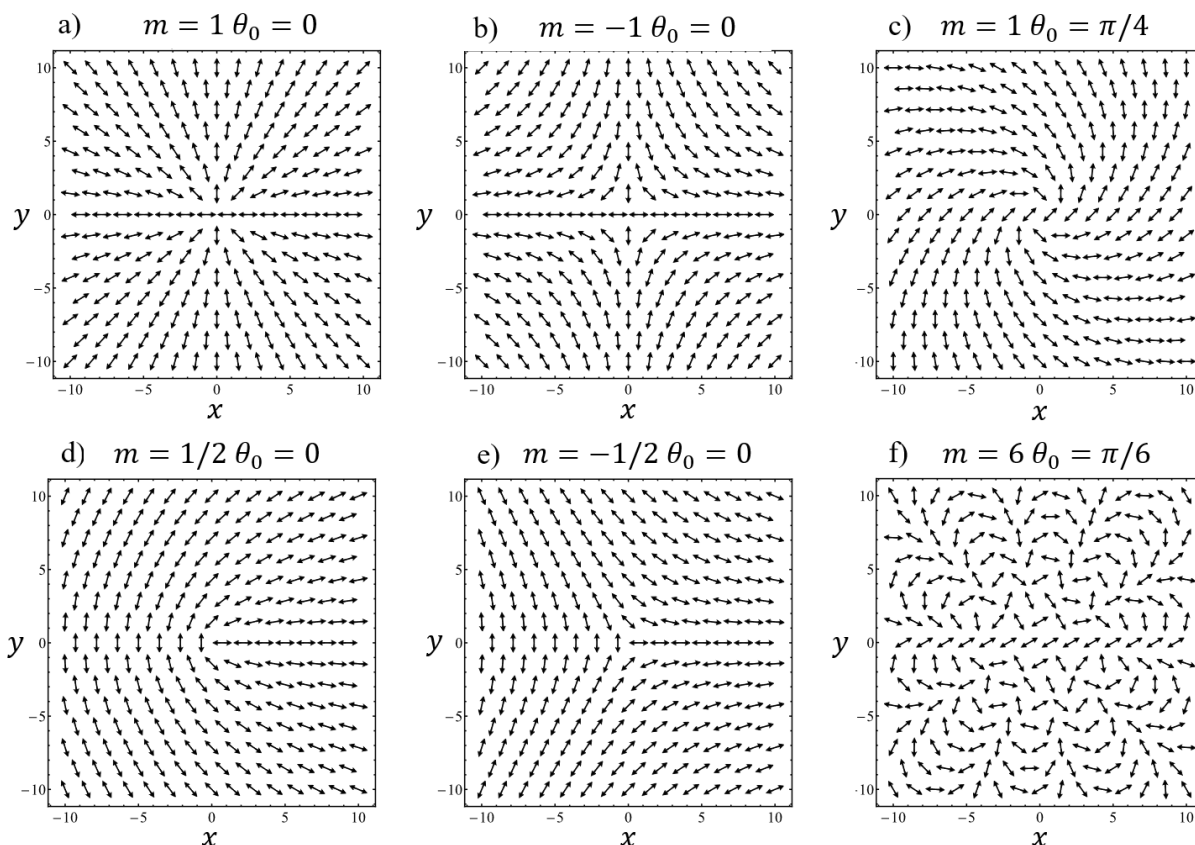
od koder sledi izraz za deformacijsko prosto energijo 2D nematskega direktorja:

$$F = \pi K q^2 \log \left( \frac{R_{max}}{r_{jedro}} \right) + F_{jedro}. \quad (24)$$

Vidimo, da je deformacijska energija točkovnega defekta na enoto dolžine v 2D odvisna od velikosti defekta in sorazmerna s kvadratom topološkega naboja defekta  $F \propto q^2$ , kar pomeni, da so točkovni defekti z večjimi topološkimi naboji (v 2D navojnimi števili ( $m$ )), energijsko neugodni. Če imamo defekt s topološkim nabojem  $|m| > 1/2$ , bo razpadel na elementarne naboje  $m_0 = \pm 1/2$ , saj je energija defekta z navojnim številom  $m = 1$  sorazmerna  $F(m = 1) \propto 1$ , medtem ko je energija dveh topoloških defektov s polovičnima navojnima številoma  $m = 1/2$ , sorazmerna  $F(m = 1/2) + F(m = 1/2) \propto 1/4 + 1/4 = 1/2$ . Ker je enačba (20) rešitev linearne diferencialne enačbe in ker se topološki naboj ohranja, tudi linearna kombinacija rešitev predstavlja rešitev diferencialne enačbe (20), kar lahko zapišemo kot:

$$\theta(x, y) = \sum_{i=1}^N \left[ m_i \tan^{-1} \left( \frac{y - y_i}{x - x_i} \right) + \theta_{0,i} \right], \quad (25)$$

kjer je  $N$  število vseh defektov v tekočem kristalu in  $(x_i, y_i)$  lega  $i$ -tega defekta [21].



Slika 8. Konfiguracije nematskega direktorja pri različnih vrednostih navojnega števila ( $m$ ) in za različne vrednosti ravnovesnih stanj ( $\theta_0$ ): a)  $m = 1, \theta_0 = 0$ , b)  $m = -1, \theta_0 = 0$ , c)  $m = 1, \theta_0 = \pi/4$ , d)  $m = 1/2, \theta_0 = 0$ , e)  $m = -1/2, \theta_0 = 0$  in f)  $m = 6, \theta_0 = \pi/6$ .

## 5 Strukture v 2D in 3D nematskem direktorju

V 2D nematskem direktorju imamo lahko samo točkovne defekte. V kolikor pa je direktor definiran v 3D, točkovni defekti lahko postanejo disklinacije (črtni defekti). Ta razlika med 2D in 3D je pomembna v nematskih tekočih kristalih med dvema substratoma s površinskim sidranjem topoloških defektov. V takšni konfiguraciji je direktorsko polje na substratu omejeno na 2D in lahko ima neskončno mnogo tipov topoloških defektov, ki jih karakterizira topološki naboj, kot smo razložili v poglavju 3. V notranjosti tekočega kristala med substratoma je nematski direktor definiran v 3D in ima lahko samo en tip disklinacij s polovičnim topološkim nabojem. Če na substrat sidramo dva topološka defekta s polovičnim topološkim nabojem, bo v notranjosti celice topološka naboja povezovala disklinacija (črtni defekt), zato da zadosti robnim pogojem. Disklinacija lahko poveže dva topološka defekta s polovičnim topološkim nabojem, ker je nematski direktor v notranjosti tekočerkristalne celice definiran v 3D, kjer so disklinacije s polovičnim topološkim nabojem med seboj topološko ekvivalentne. Imamo štiri osnovne možnosti sidranja. Sidramo lahko poljubni kombinaciji topoloških defektov s topološkim nabojem  $\pm 1/2$ , na nasprotna substrata, ali pa na isti substrat. Najpreprostejši primer sidranja topoloških defektov,

je sidranje med dvema substratoma, kot je prikazano na sliki 9a, kjer na zgornji in spodnji substrat sidramo topološki defekt s polovičnim  $+1/2$  topološkim nabojem. V tem primeru topološka defekta z nabojem  $m = +1/2$  povezuje disklinacija z nabojem  $+1/2$ . Krajevno odvisnost direktorja v notranjosti tekočerkristalne celice opisuje direktorsko polje [26]:

$$\vec{n}(x, y, z) = (\cos \theta, \sin \theta, 0), \quad (27)$$

kjer je  $\theta = \frac{1}{2} \tan^{-1} \frac{y}{x}$ . Tukaj je direktorsko polje v celoti v ravnini  $(x, y)$ .

Na spodnji substrat lahko sidramo topološki defekt s polovičnim topološkim nabojem  $+1/2$  in na zgornji substrat topološki defekt s polovičnim topološkim nabojem  $-1/2$ . V tem primeru bo oba topološka defekta spet povezovala disklinacija, saj je notranjost tekočega kristala opisana s 3D direktorskim poljem, kjer sta ta defekta ekvivalentna (slika 9b). Takšno konfiguracijo opisuje direktorsko polje [26]:

$$\vec{n}(x, y, z) = (\cos \theta, \sin \theta \cos \gamma, \sin \theta \sin \gamma), \quad (28)$$

kjer je  $\theta = \frac{1}{2} \tan^{-1} \frac{y}{x}$  in  $\gamma = \pi z/d$ . V tem primeru 3D direktorsko polje v notranjosti tekočega kristala od spodnjega substrata pri  $z = 0$  do zgornjega substrata pri  $z = d$  steče skozi celotno zaporedje disklinacijskih struktur, kot je prikazano na sliki 9c, pod pogojem, da lahko direktorsko polje prosto suče v notranjosti. Ta primer nazorno pokaže, da sta v 3D topološka defekta z nasprotnim polovičnim topološkim nabojem med seboj topološko ekvivalentna.

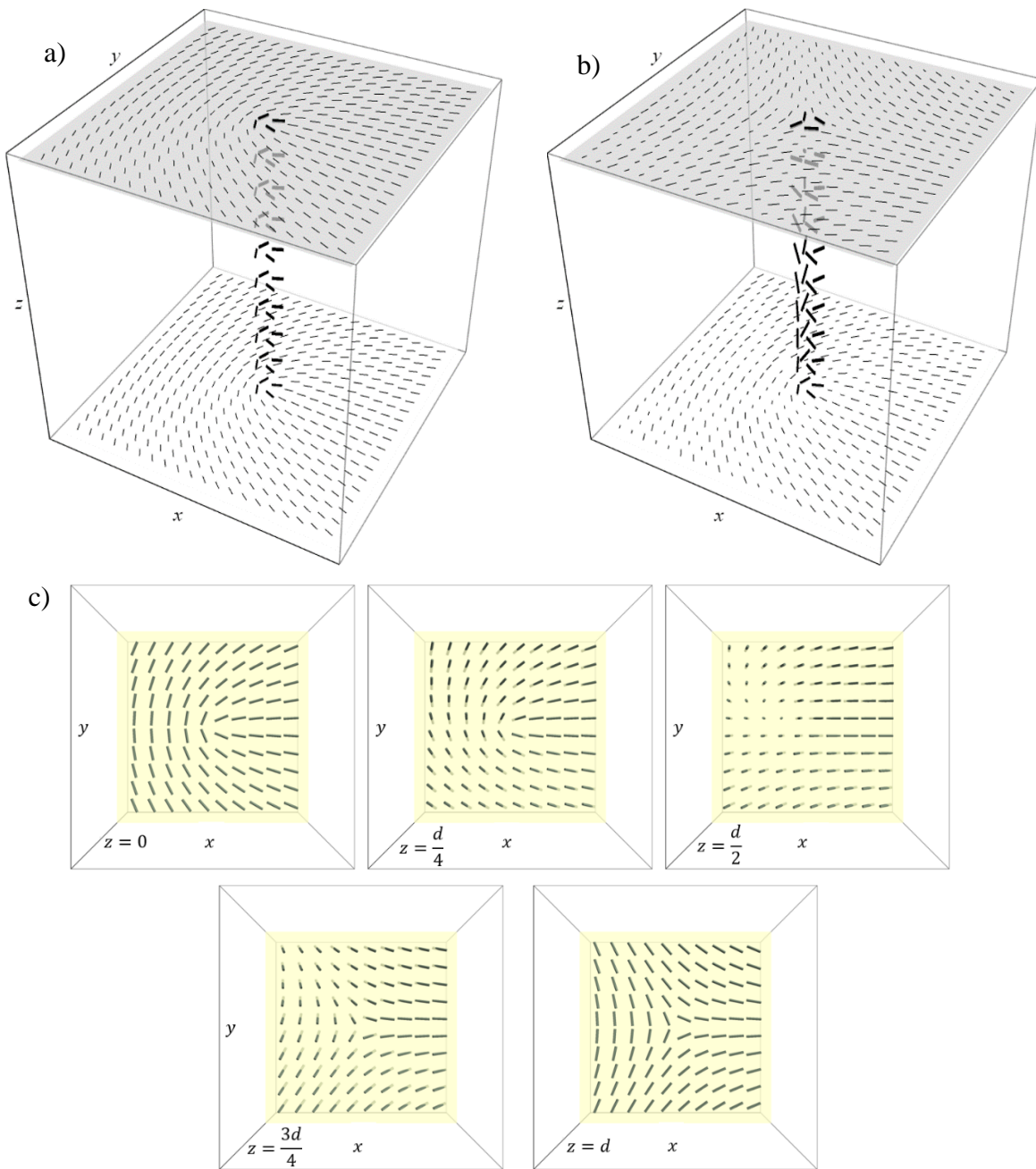
Naslednja možnost je sidranje dveh topoloških defektov z enakima ali nasprotnima polovičnima nabojema na isti substrat. Recimo, da na spodnji substrat sidramo disklinaciji z nabojema  $+1/2$  in  $-1/2$ . V tem primeru bo v notranjosti direktorsko polje defekta povezal disklinacijski polkrog. Takšno konfiguracijo opišemo z direktorskim poljem [26]:

$$\vec{n}(x, y, z) = (\cos \theta, \sin \theta, 0), \quad (29)$$

kjer je  $\theta$  podan z zvezo:

$$\theta = \begin{cases} \frac{1}{2} \tan^{-1} \left[ \frac{y}{x - \sqrt{R^2 - z^2}} \right] - \frac{1}{2} \tan^{-1} \left[ \frac{y}{x + \sqrt{R^2 - z^2}} \right]; & z \leq R, \\ 0, & z > R \end{cases}, \quad (30)$$

pri čemer je  $R$  polmer polkroga. Primer te strukture je prikazan na sliki 10a. Direktorsko polje je popolnoma v 2D, kar pomeni, da je struktura možna ne glede na to ali je  $\vec{n}$  definiran v 2D ali 3D.

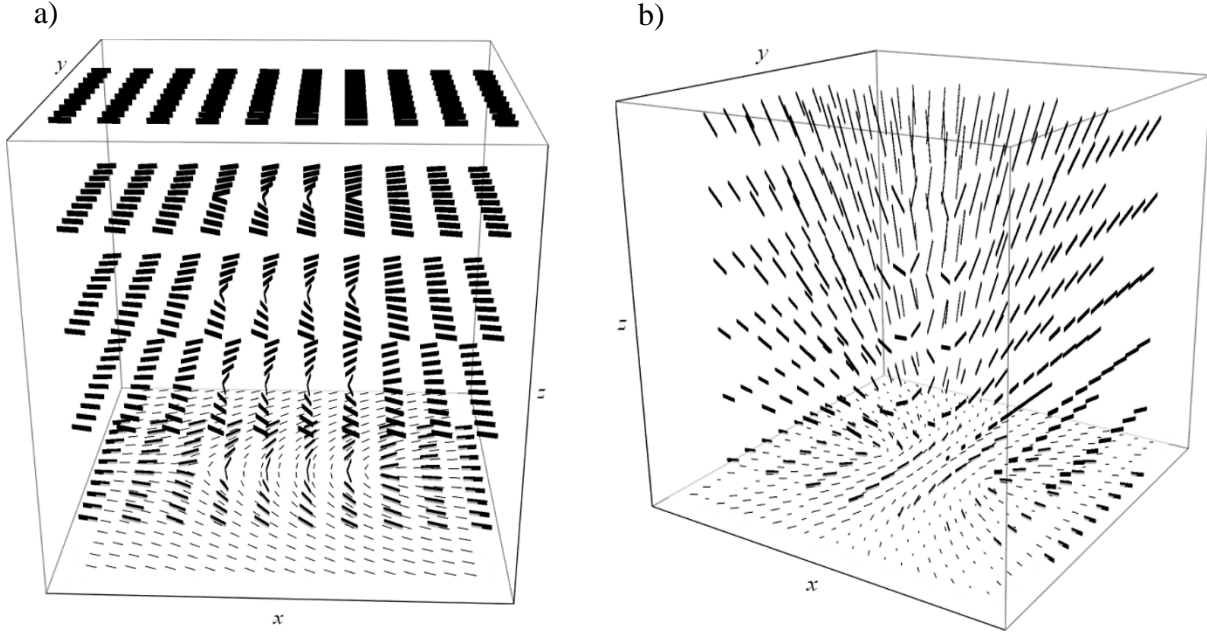


Slika 9. Na nasprotna substrata sidramo topološka defekta s topološkima nabojema: a)  $m = +1/2$  na zgornjem in na spodnjem substratu, b)  $m = -1/2$  na zgornjem substratu in topološki defekt s topološkim nabojem  $m = +1/2$  na spodnjem substratu. Topološka defekta v notranosti celice povezuje disklinacijska črta. c) Preseki disklinacije črte iz primera b) pri različnih vrednostih koordinate  $z$ , kjer je  $z = 0$  lega spodnjega substrata in  $z = d$  lega zgornjega substrata.

Na koncu pogledimo še konfiguracijo, kjer imamo dva defekta s topološkim nabojem  $+1/2$  na spodnjem substratu, notranje direktorsko polje pa povezuje defekt z disklinacijskim polkrogom. To konfiguracijo opisuje direktorsko polje [26]:

$$\vec{n}(x, y, z) = (\cos \theta \cos \phi, \sin \theta, \cos \theta \sin \phi) \quad (31)$$

kjer je  $\theta = \frac{1}{2} \tan^{-1} \left[ \frac{y}{\sqrt{x^2+z^2-R}} \right]$  in  $\phi = \tan^{-1} \frac{z}{x}$ . Strukturo prikazuje slika 10b. Takšna struktura ne more obstajati, če notranjost tekočokristalne celice ni definirana v 3D.



Slika 10. Na spodnjem substratu sidramo topološka defekta s topološkima nabojema: a)  $m = -1/2$  in  $m = +1/2$ , b)  $m = +1/2$  in  $m = +1/2$ . Topološka defekta v notranjosti tekočokristalne celice povezuje disklinacijski polkrog.

Konfiguracije nematskega direktorja prikazane na slikah 9a, 9b, 10a in 10b, lahko interpretiramo analogno svetovnicam v teoriji relativnosti [28]. Svetovnica je krivulja, ki predstavlja gibanje delca v štirirazsežnem prostoru. Če si predstavljamo koordinato  $z$  kot časovno koordinato in je vsak rez ravnine  $(x, y)$  pri nekem  $z$  slika 2D direktorskega polja, ki je odvisno od  $x, y$  in časa, je potem v primeru, prikazanem na sliki 9a, disklinacijska črta analogna svetovnici stacionarnega delca, konfiguracija, prikazana na sliki 10a, pa je analogna delcu in antidelcu, ki se približujeta in anihilirata, ekvivalentno pa si konfiguracijo, prikazano na sliki 10a, predstavljamo analogno svetovnici delca, ki se premika naprej in nazaj v času. Disklinacijska črta, prikazana na sliki 9b, je analogna svetovnici stacionarnega delca, ki se ne premika, se pa transformira skozi vse strukture, kot prikazano na sliki 9c. Disklinacijski polkrog, prikazan na sliki 10b, je analogen svetovnici dveh delcev, ki anihilirata kljub temu, da sta identična. Anihilacija identičnih topoloških defektov je dovoljena v 3D topologiji, kjer ne velja ohranitev topoloških nabojev pri seštevanju. Vse te strukture imajo neničeln naboj, razen konfiguracije, ki je prikazana na sliki 10a. V tem primeru na isti substrat sidramo dva defekta z nasprotnim polovičnim nabojem, ki ju povezuje disklinacijski polkrog. 3D topološki naboj takšne konfiguracije je enak nič ( $q^{(3)} = 0$ ).

## 6 Stabilizacija črtnih topoloških defektov brez naboja s topologijo

V poglavju 5 smo omenili strukturo (slika 10a), ki ima 2D topološki naboj ( $q^{(2)} \neq 0$ ), nima pa 3D topološkega naboja ( $q^{(3)} = 0$ ), zato je navzven nevtralna. Sedaj pa nas zanima, kako bi takšno strukturo lahko stabilizirali v 3D. Namig za to nam da ukrivljen prostor v dveh dimenzijah, kjer pozitivna Gaussova ukrivljenost ( $G > 0$ ) privlači defekte s pozitivnim topološkim nabojem, negativna Gaussova ukrivljenost ( $G < 0$ ) pa privlači defekte z negativnim topološkim nabojem. Črtni defekti, ki so navzven nevtralni, imajo dele, kjer je navojno število negativno, in dele, kjer je navojno število pozitivno. Če bi imeli ustrezno topologijo prostora, bi se pozitivni deli ( $m > 0$ ) pripeli na del, kjer je Gaussova ukrivljenost pozitivna, negativni deli ( $m < 0$ ) pa bi se pripeli na del, kjer je Gaussova ukrivljenost negativna. To vemo iz 2D analize, prav tako pa tudi preliminarne raziskave kažejo, da je to res možno [20, 21]. Primer topologije, ki bi to strukturo lokalno lahko stabilizirala, je torus, ki ima pozitivno in negativno ukrivljenost. Gauss-Bonnetov teorem pravi [23], da je vsota nabojev ( $m_{tot}$ ) enaka integralu Gaussove ukrivljenosti zaključene površine:

$$m_{tot} = \frac{1}{2\pi} \iint G d^2r, \quad (32)$$

kjer je  $G = 1/R_1R_2 = \sigma_1\sigma_2$  Gaussova ukrivljenost,  $R_1$  polmer glavne ukrivljenosti  $\sigma_1$  in  $R_2$  polmer glavne ukrivljenosti  $\sigma_2$ . Poincaréjev teorem pravi [23], da je celoten topološki naboj, to je vsota nabojev vseh topoloških defektov, enak Eulerjevi značilnosti površine ( $\chi$ ):

$$\chi = 2(1 - g), \quad (33)$$

kjer je  $g$  rod površine, ki je odvisen od števila lukenj površine. Velja da je  $\chi = m_{tot}$ . Ta rezultat nam pove, da je Eulerjeva značilnost odvisna le od števila lukenj ( $g$ ). Za torus je  $g = 1$ , zato je  $m_{tot} = 0$ . Izpostaviti je potrebno, da imamo zelo enostaven model, ki pa kaže, da lahko navzven nevtralne disklinacije, ki se obnašajo kot defekt in antidefekt, stabiliziramo s topologijo. Če bi bili nevtrini takšne disklinacijske zanke, bi v naravi lahko bili stabilni v večdimenzionalnem prostoru, ki ima ustrezno topologijo. Preliminarni poskusi [40] na tekočih kristalih, kjer molekule obdajajo koloidne nanodelce torusne oblike, podpirajo našo napoved.

## 7 Zaključek

V diplomskem seminarju smo obravnavali tekoče kristale, pri čemer smo se omejili na nematsko fazo, kjer se dolge osi molekul orientacijsko poravnajo glede na preferenčno smer, ki jo podamo z nematskim direktorjem. Orientacijsko urejenost smo opisali s tenzorskim ureditvenim parametrom, ki se lahko spreminjal s krajem in časom. Na določenih mestih v nematiku orientacijski red izgine. Takšna mesta imenujemo topološki defekti. Vpeljali smo prostor ureditvenega parametra, ki predstavlja vse možne realizacije tenzorskega ureditvenega parametra, da smo določili topološki naboj različnih topoloških defektov. V 2D nematikih obstajajo samo

točkovni defekti. V 3D nematiku obstajajo točkovni defekti imenovani ježasti defekti, in črtni defekti, imenovani disklinacije. Uporabili smo parametrizacijo za 2D nematski direktor, da smo izračunali topološki naboj 2D defekta (točkovni defekt), ki se imenuje navojno število in je analogen spinskemu številu. Takšnih 2D točkovnih defektov je neskončno mnogo. Pri seštevanju topoloških nabojev različnih topoloških defektov v 2D se topološki naboj ohranja. Izračunali smo naboj ježastega defekta. V primeru 3D topoloških defektov se topološki naboj pri seštevanju ne ohranja.

Za opazovani sistem smo zapisali gostoto deformacijske proste energije, ki predstavlja gostoto proste energije zaradi deformacije direktorja, pri čemer smo upoštevali, da je skalarni ureditveni parameter približno konstanten. Z minimizacijo deformacijske proste energije smo dobili krajevno odvisnost direktorskega polja okoli defektov. Izračunali smo deformacijsko prosto energijo 2D defektov in pokazali, da je deformacijska prosta energija sorazmerna s kvadratom navojnega števila. Predstavili smo različne strukture v tekočerkristalni celici, kjer smo na substrat sidrali topološke defekte z različnimi polovičnimi topološkimi naboji. Topološki defekti na substratu so bili omejeni na 2D, v notranjosti celice pa je nematski direktor bil definiran v 3D, zato je topološka defekta lahko povezala disklinacija. Vse te strukture so imele neničeln topološki naboj, razen konfiguracije, kjer smo na isti substrat sidrali dva topološka defekta z nasprotnim polovičnim nabojem. 3D naboj te konfiguracije je bil enak nič. Konfiguracija navzven nevtralne disklinacije, ki se obnaša kot delec in antidelec, je v ravnem prostoru nestabilna. Pokazali smo, da navzven nevtralne disklinacije lahko stabiliziramo s topologijo torusa. Če bi nevtrini bili takšne disklinacijske zanke, bi v naravi lahko bili stabilni v več-dimenzionalnem prostoru z ustrezno topologijo. Preliminarni poskusi [40] podpirajo našo napoved.

Raziskavo bi lahko nadaljevali s podrobnejšo obravnavo vpliva ukrivljenosti na lego in stabilnost topološkega defekta. V ta namen bi morali izhajati iz tenzorskega zapisa gostote proste energije in energiji dodati še površinsko prosto energijo.

## Literatura in viri

[1] A. Romanino, *The Standard Model of Particle Physics*. Pridobljeno 24. 7. 2022, iz <https://www.slac.stanford.edu/econf/C0907232/pdf/001.pdf>.

[2] R. Serway, C. Moses in C. Moyer, *Modern Physics* (Brooks/Cole, California, 2005).

[3] L. Boulicaut in M. Elise, *Standard Model – ATLAS Physics Cheat Sheet*, Atlas Outreach (2021).

[4] The KATRIN Collaboration, *Direct neutrino-mass measurement with sub-electronvolt sensitivity*, Nat. Phys. **18**, 160 (2022).

[5] M. Agostini in sod., (GERDA Collaboration), *Final Results of GERDA on the Search for Neutrinoless Double- $\beta$  Decay*, Phys. Rev. Lett. **125**, 252502 (2020).

- [6] E. Majorana, *Teoria simmetrica dell'elettrone e del positrone*, Nuovo Cim **14**, 171 (1937).
- [7] T. H. R. Skyrme, *A non-linear field theory*, Proc. R. Soc. Lond. A **260**, 127 (1961).
- [8] I. Chuang, R. Durrer, N. Turok in B. Yurke, *Cosmology in the Laboratory: Defect dynamics in Liquid Crystals*. Science **251**, 1336 (1991).
- [9] T. Kibble, *Phase-transition dynamics in the lab and the universe*. Phys. Today **60** (2007).
- [10] A. del Campo in W. H. Zurek, *Universality of Phase transition Dynamics: Topological Defects from Symmetry Breaking*, Int. J. Mod. Phys. A **29** (2013).
- [11] M. D. Mermin, *The topological theory of defects in ordered media*, Rev. Mod. Phys. **51**, 591 (1979).
- [12] P. G. de Gennes in J. Prost, *The Physics of Liquid Crystals* (Oxford University Press, Oxford, 1993).
- [13] P. M. Chaikin in T. C. Lubensky, *Principles of Condensed Matter Physics* (Cambridge University Press, Cambridge, 1995).
- [14] M. Kleman in O. Lavrentovich, *Soft Matter Physics: An Introduction* (Springer, New York, 2003).
- [15] J. M. Stephen in J. P. Straley, *Physics of liquid crystals*, Rev. Mod. Phys. **46**, 617 (1974).
- [16] M. Tasinkevych, *A Short Introduction to Liquid Crystals*. Pridobljeno 30. 7. 2022, iz [https://fenix.ciencias.ulisboa.pt/downloadFile/2251937252646573/LC\\_Notes\\_v3.pdf](https://fenix.ciencias.ulisboa.pt/downloadFile/2251937252646573/LC_Notes_v3.pdf) .
- [17] G. P. Alexander in sod., *Colloquium: Disclination loops, point defects, and all that in nematic liquid crystals*, Rev. Mod. Phys. **84**, 497 (2012).
- [18] S. Čopar, *Topology and geometry of nematic braid*, Phys. Rep. **538**, 1 (2017).
- [19] O. D. Lavrentovich, *Topological defects in dispersed words and worlds around liquid crystals, or liquid crystal drops*, Liq. Cryst. **24**, 117 (1998).
- [20] M. Kleman in O. D. Lavrentovich, *Topological point defects in nematic liquid crystals*, Phylos. Mag. **86**, 4117 (2006).



- [21] M. Urbanski in sod., *Liquid crystals in micron-scale droplets, shells and fibers*, J. Phys.: Condens. Matter **29**, 133003 (2017).
- [22] S. Kralj, L. Mesarec, P. Kurioz, S. Rzoska in A. Iglič, *Topological Defects: From Simplicity to Complexity*, Glob. j. sci. front. res. **17**, 3 (2017).
- [23] M. Kralj, M. Kralj in S. Kralj, *Topological Defects in Nematic Liquid Crystals: Laboratory of Fundamental Physics*, Phys. Status Solidi A **218**, 2000752 (2021).
- [24] D. Guillaume in sod., *Topological structure and dynamics of three-dimensional active nematics*. Science **367**, 1120 (2020).
- [25] C. Long in sod., *Geometry and mechanics of disclination lines in 3D nematic liquid crystals*, Soft Matter **17**, 2265 (2021).
- [26] S. Afgan, J. V. Selinger in L. B. R. Selinger, *Visualising the crossover between 3D and 2D topological defects in nematic liquid crystals*, Liquid Crystals, Liq. Cryst. **45**, 2022 (2018).
- [27] K. Harth in R. Stannarius, *Topological Point Defects of Liquid Crystals in Quasi-Two-Dimensional Geometries*, Front. Phys. **8**, 112 (2020).
- [28] T. Xingzhou in J. V. Selinger, *Orientation of topological defects in 2D nematic liquid crystals*, Soft Matter **13**, 5481 (2017).
- [29] S. Čopar in S. Žumer, *Topological and geometric decomposition of nematic textures*, Phys. Rev. E **85**, 031701 (2012).
- [30] G. Vertogen, *Elastic constants and the continuum theory of liquid crystals*, Physica A **117**, 227 (1983).
- [31] S. Kralj in sod., *Electric field driven reconfigurable multistable topological defect patterns*, Phys. Rev. Res. **2**, 013176 (2020).
- [32] L. Mesarec, G. Wojciech, A. Iglič in S. Kralj, *Effective Topological Charge Cancellation Mechanism*, Sci. Rep. **6**, 27117 (2017).
- [33] F. Serra, *Curvature and defects in nematic liquid crystals*, Liq. Cryst. **43**, 1920 (2016).
- [34] L. Mesarec, *Topološki defekti v nematičnih lupinah*, Magistrska naloga (Univerza v Mariboru, Fakulteta za naravoslovje in matematiko, Maribor, 2013).
- [35] L. Mesarec, *Impact of curvature on nematic topological defects*, Doktorska disertacija (Univerza v Mariboru, Fakulteta za naravoslovje in matematiko, Maribor, 2018).

[36] L. Mesarec, P. Kurioz, A. Igljč in W. Gozdz, *Curvature-controlled topological defects*, Crystals **7**, 153 (2017).

[37] Wikipedia, *Standard Model*, Pridobljeno 24.7.2022, iz [https://upload.wikimedia.org/wikipedia/commons/0/00/Standard\\_Model\\_of\\_Elementary\\_Particle\\_s.svg](https://upload.wikimedia.org/wikipedia/commons/0/00/Standard_Model_of_Elementary_Particle_s.svg) .

[38] C. Chang, Y. Zhao, Y. Liu in L. An, *Liquid crystallinity of nanotubes*, RSC Adv. **8**, 15780 (2018).

[39] Wikipedia, *Liquid Crystal*, Pridobljeno 24. 7. 2022, iz [http://en.wikipedia.org/wiki/Liquid\\_crystal#/media/File:MBBA\\_cleaner.svg](http://en.wikipedia.org/wiki/Liquid_crystal#/media/File:MBBA_cleaner.svg) .

[40] U. Jagodič, zasebna komunikacija.