

MULTISTABILNE MREŽE TOPOLOŠKIH DEFEKTOV

SAŠA HARKAI¹ IN SAMO KRALJ^{2,3}

Sprejeto
12. 9. 2022

Recenzirano
26. 10. 2022

Izdano
9. 6. 2023

¹ Univerza v Ljubljani, Fakulteta za matematiko in fiziko, Ljubljana, Slovenija,
sasa.harkai@fmf.uni-lj.si.

^{2,3} Univerza v Mariboru, Fakulteta za naravoslovje in matematiko, Maribor, Slovenija,
Odsek za fiziko trdne snovi, Inštitut Jožef Stefan, Ljubljana, Slovenija,
samo.kralj@um.si.

DOPIŠNI AVTOR
sasa.harkai@fmf.uni-lj.si

Topološki defekti se pojavijo ob faznih prehodih, pri katerih pride do zloma simetrije in so vseprisotni v naravi. Okolje, v katerem jih najlažje lahko preučujemo, so nematski tekoči kristali. Nematske strukture opišemo na mezoskopski skali s tenzorskim ureditvenim parametrom in določimo ravnovesna stanja z numerično minimizacijo proste energije. V sistem vsiljujemo topološke defekte preko robnih pogojev na mejnih površinah. Najprej pokažemo, da se že z vsiljevanjem enega defekta lahko vzpostavijo različna ravnovesna stanja glede na debelino celice. V primeru vsiljevanja večih defektov na spodnji mejni površini lahko v sistemu vzpostavimo ravnovesna stanja z »nenabitimi«¹ linijskimi defekti. Z vsiljevanjem 4x4 kvadratne mreže defektov lahko v sistemu vzpostavimo kompleksne vzorce nenabitih linijskih defektov, kjer jih je 18 kvantitativno in 7 kvalitativno različnih. Prikažemo, da lahko z uporabo zunanega električnega polja reverzibilno prehajamo iz enega vzorca v drugega. Prikazani sistemi bi se lahko uporabili v multistabilnih optičnih prikazovalnikih in prevezljivih nanožičkah.

Ključne besede:

tekoči kristali,
nematiki,
topološki defekti,
mreže,
simetrija



<https://doi.org/10.18690/analipazu.13.1.33-50.2023>
Besedilo © Hrkai, Kralj, 2023



MULTISTABLE NETWORKS OF TOPOLOGICAL DEFECTS

SAŠA HARKAI¹ AND SAMO KRALJ^{2,3}¹ University of Ljubljana, Faculty of Mathematics and Physics, Ljubljana, Slovenia, sasa.harkai@fmf.uni-lj.si.^{2,3} University of Maribor, Faculty of Natural sciences and Mathematics, Maribor, Slovenia, Jožef Stefan Institute, Department of Condensed Matter Physics, Ljubljana, Slovenia, samo.kralj@um.si.

CORRESPONDING AUTHOR

sasa.harkai@fmf.uni-lj.si

Topological defects are a consequence of symmetry-breaking phase transitions and are ubiquitous in nature. An environment where they most easily studied, are nematic liquid crystals. We describe nematic structures at the mesoscopic scale with a tensor order parameter and we determine equilibrium states by numerically minimizing free energy. We enforce defects through boundary conditions at enclosing surfaces. First we show that there are multiple equilibrium states possible by just enforcing one defect, depending on the thickness of the cell. While enforcing multiple defects at the bottom surface we can create equilibrium states with “chargeless” line defects. By enforcing a 4x4 network of defects we can create complex patterns of chargeless line defects, where 18 are quantitatively and 7 are qualitatively different. We also demonstrate how to rewire the line defects to transition from one pattern to another and back. Our system could lead to multistable optical displays and rewirable nanowires.

Accepted

12. 9. 2022

Revised

26. 10. 2022

Published

9. 6. 2023

Keywords:liquid crystal,
nematics,
topological defects,
networks,
symmetry

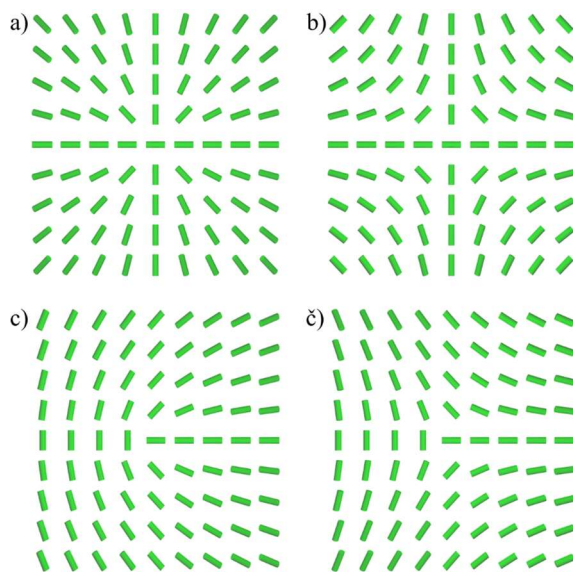
1 Uvod

Topološki defekti (TD-ji) so točke, linije, ali ravnine (Mermin, 1979), na katerih ne moremo enolično določiti polje ureditvenega parametra in so posledica faznih prehodov, v katerih pride to zloma simetrije. TD-ji so izrednega pomena na vseh velikostnih skalah, od nanoskopske vse do kozmološke skale (Chesler, 2015). Njihova stabilnost je zagotovljena zaradi topologije, ki je popolnoma neodvisna od mikroskopske strukture sistema. Zaradi tega TD-ji izkazujejo univerzalno obnašanje ne glede na fizikalni sistem, v katerem se nahajajo.

Nematski tekoči kristali so idealno okolje za preučevanje TD-jev zaradi odzivnosti na zunanje vplive ter velike optične in električne anizotropije. V tekočih kristalih lahko preprosto ustvarimo, stabiliziramo, manipuliramo in opazujemo defekte. Tako so mogoče različne tehnološke aplikacije, kot so spreminjanje optičnih lastnosti tekočih kristalov (de Gennes in Prost, 1994), ustvarjanje optičnih vrtincev (Marucci, Manzo in Paparo, 2006) in učinkovito lovljenje primerno tretiranih nano (Kikuchi idr., 2002; Coursault idr., 2012; Liu idr., 2010; Karatairi idr., 2010) ali koloidnih delcev (Yoshida idr., 2015; Pires, Fleury in Galerne, 2007). Nematska faza je najpreprostejša tekočokristalna faza (de Gennes in Prost, 1994), kjer lahko sistem opišemo kot tekočino iz paličastih molekul. Lokalno lahko opišemo urejenost z enotskim vektorjem \mathbf{n} , ki ga imenujemo nematski direktor. V primeru tekočega kristala sta nasprotni smeri $\pm\mathbf{n}$ enakovredni.

V ravnovesju v sistemu vlada orientacijski red, kjer je \mathbf{n} homogen vzdolž smeri zloma simetrije. Z uvedbo zunanjih vplivov lahko v sistemu pride do frustracije, kar pa lahko povzroči defekte. V tridimenzionalnih sistemih so najpogostejši linijski defekti ali disklinacije, ki jih kvantitativno opišemo s topološkim nabojem q , v dveh dimenzijah pa z navojnim številom m . Vrednost m določimo tako, da obkrožimo TD v nasprotni smeri urinega kazalca in preštejemo, koliko stanj lahko \mathbf{n} zasede v primerjavi z vsemi mogočimi stanji \mathbf{n} . Če \mathbf{n} zasede vsa mogoča stanja natanko enkrat (kaže v vse mogoče smeri), potem je $|m| = 1$ (slika 1a,b). V nekaterih primerih lahko \mathbf{n} zasede vsa stanja več kot enkrat in v takih primerih je vrednost m enaka temu, kolikokrat zasede vsa stanja. V nematskih tekočih kristalih pa so mogoča še stanja s polovičnim m ($|m| = 1/2$) zaradi enakovrednosti $\pm\mathbf{n}$ (slika 1c,d). Pri tem je pomembno paziti na smer vrtenja \mathbf{n} ko obkrožamo defekt, kajti če se \mathbf{n} vrti v

enaki smeri (nasproti urinega kazalca), potem je vrednost m pozitivna ($m > 0$), drugače je negativna ($m < 0$).



Slika 1: Razni topološki defekti a) $m = 1$, b) $m = -1$, c) $m = 1/2$, d) $m = -1/2$.

Vir: lasten.

V 2. poglavju predstavimo teoretično ozadje in numerični model, s katerim smo simulirali sistem. V 3. poglavju prikažemo numerične rezultate, natančneje multistabilnost in možnosti za preklapljanje med poljubnimi stabilnimi stanji sistema. V 4. poglavju predstavimo zaključke in mogoče aplikacije naših rezultatov.

2 Topološki defekti v tekočem kristalu

V tem delu smo se osredotočili na numerične simulacije tekočega kristala v planparalelni celici, kjer na spodnji mejni površini vsiljujemo topološke defekte, s čimer lahko stabiliziramo disklinacije v sistemu. Na zgornji površini pa vsiljujemo planarne degenerirane pogoje, pri katerih lahko direktor kaže v poljubno smer, ki je znotraj ravnine površine (v našem primeru v (x, y) ravnini). Eksperimentalno lahko to dosežemo z mikroskopom na atomsko silo (Murray, Pelcovits in Rosenblatt,

2014). Na vsaki točki na spodnji površini tako ustvarimo preferenčno smer $\phi(x, y)$, katero določimo po enačbi:

$$\phi(x, y) = \sum_{i=1}^N m_i \text{ArcTan}\left(\frac{y-y_i}{x-x_i}\right) + \phi_0, \quad (1)$$

kjer je N število defektov, (x_i, y_i) je lega i -tega defekta in ϕ_0 je konstanta. En. 1 je rešitev Laplaceove enačbe za ravnovesno stanje z defekti v primeru približka z eno elastično konstanto (Nehring in Saupe, 1972). Energija sistema z defekti je sorazmerna z m^2 (de Gennes in Prost, 1994; Svenšek in Žumer, 2004; Stannarius in Harth, 2016; Kralj, Murray in Rosenblatt, 2017). TD-ji so topološko zaščiteni in jih posledično ne moremo odstraniti iz sistema le z zveznim spreminjanjem ureditve brez uvedbe novih defektov.

2.1 Prosta energija tekočega kristala

Za modeliranje tekočega kristala smo uporabili Landau-de Gennesov mezoskopski pristop (de Gennes in Prost, 1994), v katerem smo nematski orientacijski red predstavili z brezslednim simetričnim tenzorskim ureditvenim parametrom \mathbf{Q} . Ta tenzor lahko v splošnem zapišemo kot:

$$\mathbf{Q} = \sum_{i=1}^3 \lambda_i (\mathbf{e}_i \otimes \mathbf{e}_i), \quad (2)$$

kjer sta \mathbf{e}_i lastni vektor in λ_i pripadajoča lastna vrednost. Ker pa se bomo ukvarjali s tekočim kristalom, ki je predvsem enoosen, lahko en. 1 poenostavimo tako:

$$\mathbf{Q} = S \left(\mathbf{n} \otimes \mathbf{n} - \frac{1}{3} \mathbf{I} \right). \quad (3)$$

Tu je \mathbf{I} enotski tenzor, S je skalarni ureditveni parameter in lahko zasede vrednosti $S \in \left[-\frac{1}{2}, 1\right]$. Vrednost 1 pomeni, da je celotni sistem usmerjen vzdolž nematskega direktorja \mathbf{n} , vrednost $-\frac{1}{2}$, da je celotni sistem usmerjen pravokotno na \mathbf{n} , 0 pa, da je sistem usmerjen enakomerno po vseh smereh oz. je v izotropni fazi. Vmesne vrednosti pa predstavljajo različne nivoje urejenosti vzdolž \mathbf{n} . En. 3 velja za enoosne sisteme, ampak ob prisotnosti elastičnih deformacij se lahko v sistemu pojavi lokalna dvoosnost β^2 , ki jo določimo z enačbo:

$$\beta^2 = 1 - \frac{6(\text{Tr}\mathbf{Q}^3)^2}{(\text{Tr}\mathbf{Q}^2)^3}, \quad (4)$$

Kjer lahko β^2 zasede vrednosti med vključno 0 (enoosno stanje) in 1 (maksimalna dvoosnost). Za sistem predpostavimo, da lahko časovni in prostorni razvoj opišemo z enim parametrom γ (Ravnik in Žumer, 2010): $\gamma \frac{d\mathbf{Q}}{dt} = -\frac{\delta F}{\delta \mathbf{Q}}$, kjer je F prosta energija in je definirana kot integral gostote proste energije f po celotnem sistemu. Gostota proste energije je sestavljena iz več členov, ki so kondenzacijski (f_c), elastični (f_e) in člen za vpliv zunanjega polja (f_f):

$$f_c = \frac{1}{2}A_0(T - T^*)\text{Tr}\mathbf{Q}^2 - \frac{1}{3}B \text{Tr}\mathbf{Q}^3 + \frac{1}{4}C (\text{Tr}\mathbf{Q}^2)^2, \quad (5a)$$

$$f_e = \frac{1}{2}L|\nabla\mathbf{Q}|^2, \quad (5b)$$

$$f_f = -\frac{1}{2}\varepsilon_0 \Delta\varepsilon E^2 \mathbf{e}_E \cdot \mathbf{Q} \mathbf{e}_E. \quad (5c)$$

Tu so A_0 , B in C fenomenološke konstante, T^* je podhladitvena temperatura izotropne faze, L je elastična konstanta ob uporabi približka ene elastične konstante, $\mathbf{E} = E\mathbf{e}_E$ je zunanje električno polje vzdolž smeri enotskega vektorja \mathbf{e}_E , ε_0 je influenčna konstanta in $\Delta\varepsilon$ je anizotropija dielektrične konstante. Površinskega člena proste energije ne upoštevamo, ker na mejnih površinah upoštevamo močne robne pogoje, zaradi katerih ima tekoči kristal točno tako ureditev, kot jo vsiljujemo.

2.2 Parametrizacija in skaliranje

V naših simulacijah smo uporabili parametrizacijo na osnovi kartezijskega koordinatnega sistema, definirane z enotskimi vektorji ($\mathbf{e}_x, \mathbf{e}_y, \mathbf{e}_z$):

$$\mathbf{Q} = \begin{bmatrix} q_1 + q_2 & q_3 & q_4 \\ q_3 & q_1 - q_2 & q_5 \\ q_4 & q_5 & -2q_1 \end{bmatrix}, \quad (6)$$

kjer so q_1, q_2, q_3, q_4 in q_5 variacijski parametri. Poleg tega smo uvedli brezdimenzijske količine, kot sta brezdimenzijska temperatura $r = (T - T^*) / (T^{**} - T^*)$ in skaliran ureditveni parameter $\tilde{\mathbf{Q}} = \mathbf{Q} / S_0$, kjer je $S_0 = \frac{B}{4C}$ in $T^{**} = T^* + B^2 / (24A_0C)$ je temperatura pregrevanja izotropne faze. Razdalje smo skalirali glede na debelino celice h in čas glede na relaksacijski čas ureditvenega parametra

$\tau = \frac{2\gamma}{3A_0(T^{**}-T^*)}$ pri $T = T^{**}$. Tako lahko zapišemo vse člene gostote proste energije \tilde{f}_c , \tilde{f}_e in \tilde{f}_f kot:

$$\tilde{f}_c = \frac{r}{6} \text{Tr} \tilde{\mathbf{Q}}^2 - \frac{2}{3} \text{Tr} \tilde{\mathbf{Q}}^3 + \frac{1}{8} (\text{Tr} \tilde{\mathbf{Q}}^2)^2, \quad (7a)$$

$$\tilde{f}_e = \left(\frac{\xi_b}{h}\right)^2 |\tilde{\nabla} \tilde{\mathbf{Q}}|^2, \quad (7b)$$

$$\tilde{f}_f = -\left(\frac{\xi_b}{\xi_{Em}}\right)^2 \mathbf{e}_E \cdot \tilde{\mathbf{Q}} \mathbf{e}_E. \quad (7c)$$

Tukaj je $\xi_b = \sqrt{LC}/B$ temeljna dvoosna korelacijska dolžina (Bisi, Garland, Rosso in Virga, 2003), $\xi_E = \sqrt{LS_0/(\epsilon_0 \Delta \epsilon E^2)}$ je ekstrapolacijska dolžina zunanjega polja pri $T = T^{**}$, in $\tilde{\nabla} = h \nabla$.

Minimizacijo opravljamo numerično relativno globoko ($r = -4$) v nematski fazi. Na spodnji mejni površini vsiljujemo željene vzorce, na zgornji planarne degenerirane, ob straneh pa proste pogoje. Za dobljena stabilna stanja simuliramo tudi mikroskopske slike pod prekrizanima polarizatorjema, za kar uporabimo preprost Jonesov model širjenja žarkov (Goldstein, 2010), kjer ne upoštevamo sipanja ali odboja svetlobe.

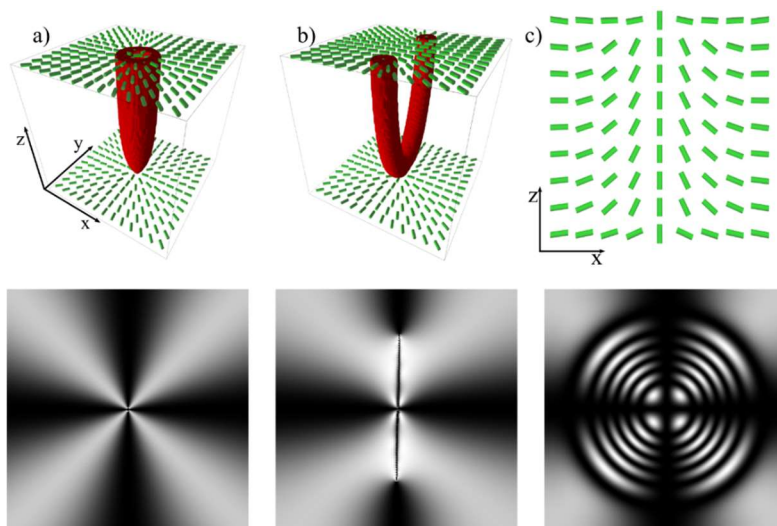
3 Rezultati

Osredotočili smo se na vsiljevanje defekta z $|m| = 1$ ali z $|m| = 1/2$ na spodnji površini sistema. Rezultate smo prikazali predvsem s krajevno odvisnostjo stopnje dvoosnosti (β^2), pogosto tudi s izrisom območij, v katerih $\beta^2 > 0.8$, saj jedro defekta dobro opišejo področja z maksimalno dvoosnostjo (Kralj, 1999). Izrisali smo tudi krajevni potek \mathbf{n} in simulirane slike pod prekrizanima polarizatorjema.

3.1 En defekt z $m=1$

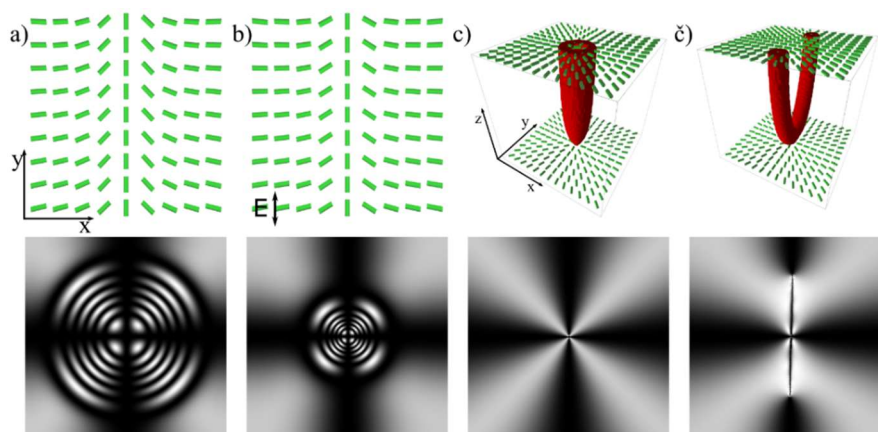
V primeru defekta z $m = 1$ na spodnji površini sistema smo našli različna ravnovesna stanja glede na h . V tankih celicah, ko je debelina celice primerljiva z ξ_b ($h < 5\xi_b$), je stabilen nerazcepljen defekt. Ker je celica zelo tanka, je vpliv površine močan in je direktorsko polje učinkovito omejeno na dve dimenziji in se defekt ne razcepi. Tako je v sistemu le ena disklinacija, ki povezuje spodnjo in zgornjo mejno površino (slika 2 a). V malo debelejših celicah, na primer $h = 5\xi_b$, pride do razcepa defekta in znotraj sistema se nahajata dve disklinaciji z $m = 1/2$. Ker sta ti dve disklinaciji enakega predznaka, se odbijata in se znotraj celice tudi razmakneta in ustvarita strukturo, ki izgleda kot črka V (slika 2 b). Vpliv mejnih površin je še vedno dovolj močan, da je direktorsko polje učinkovito omejeno na dve dimenziji, vendar je dovolj prostora za razcep defekta, kar je energijsko bolj ugodno od nerazcepljene strukture, saj je energija sorazmerna z m^2 . V še debelejši celici ($h = 50\xi_b$) pa je vpliv mejnih površin na strukturo v sredini celice dovolj šibek, da je ravnovesno stanje s pobegom v tretjo dimenzijo (slika 2 c) (Susser, Harkai, Kralj in Rosenblatt, 2020). Pri strukturah s pobegom v tretjo dimenzijo izgleda projekcija direktorskega polja na (x, y) ravnino enako kot v primeru defekta z $m = 1$ (slika 1 a), le da je direktorsko polje usmerjeno vse bolj vzdolž z osi. Tako se sistem izogne strukturi z defektom.

Na ravnovesno stanje v sistemu lahko vplivamo z zunanjim električnim poljem (\mathbf{E}). Tekoči kristal z negativno dielektrično anizotropijo ($\Delta\epsilon < 0$) ima težnjo, da je \mathbf{n} pravokoten na \mathbf{E} . Nad kritično vrednostjo $\mathbf{E} = \mathbf{E}_c$ vzdolž z osi postane sistem učinkovito dvodimenzionalen v (x, y) ravnini. Če vzpostavimo tak \mathbf{E} v sistemu s pobeglo strukturo, se pri šibkem \mathbf{E} polmer območja okrog sredine pobegle strukture, v katerem je z -komponenta \mathbf{n} neničelna, zmanjša (slika 3 a). Z dovolj močnim \mathbf{E} postane sistem učinkovito dvodimenzionalen, tako se v celici vzpostavi en defekt z $m = 1$ (slika 3 b), ki hitro razpade na dva defekta z $m = 1/2$ (slika 3 c).



Slika 2: Ravnesna stanja v celici z defektom z $m=1$ na spodnji mejni površini a) $h=3\xi_b$, b) $h=5\xi_b$, c, $h=50\xi_b$. V zgornji vrsti so 3D prikazi leg $z^2 > 0.8$ in z direktorskim poljem blizu zgornje in spodnje površine (v sliki c je direktorsko polje v (x,z) ravnini v sredini celice), v spodnji so simulirane slike pod prekrizanimi polarizatorjema.

Vir: lasten.

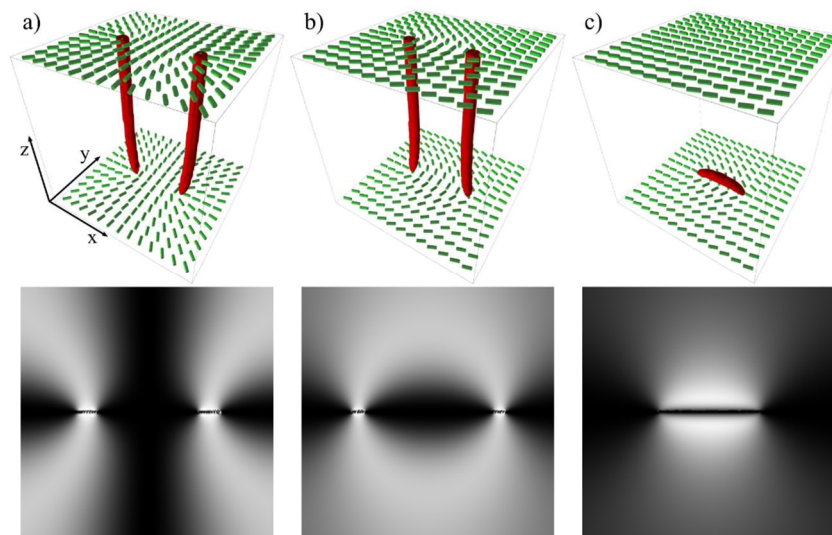


Slika 3: Prehod iz pobegle v razcepljeno strukturo v zunanjem E. A) začetno pobeglo stanje, b) sistem v šibkem E, c) sistem v E nad kritično vrednostjo E_c takoj po prehodu in č) po razcepu. Zgoraj so strukture, spodaj pa pripadajoče slike pod prekrizanimi polarizatorjema.

Vir: lasten.

3.2 Dva defekta z $|m| = 1/2$

Z vsiljevanjem dveh defektov na spodnji mejni površini obstajajo možnosti za kompleksnejše interakcije. Defekti se obnašajo podobno kot elektrostatični monopoli v prisotnosti drugih elektrostatičnih monopolov. Defekta z enakim predznakom m se bosta odbijala, medtem ko se bosta defekta z nasprotnim predznakom privlačila. Tako se bosta disklinaciji z enakim predznakom medsebojno oddaljevali, z nasprotnim predznakom pa približevali (slika 4 a,b). Ko je njuna medsebojna razdalja d_s na spodnji mejni površini dovolj majhna ($d_s < 2h$), se disklinaciji z nasprotnim predznakom privlačita dovolj močno, da se povežeta skupaj (slika 4 c). Tako nastane nova disklinacija, kjer ima ena polovica pozitivni, druga polovica pa negativni m , kar skupno pomeni, da nima topološkega naboja. Taka disklinacija se imenuje disklinacija brez naboja. Ta disklinacija je omejena le na območje ob površini, kajti tedaj je v sistemu najnižja energija.

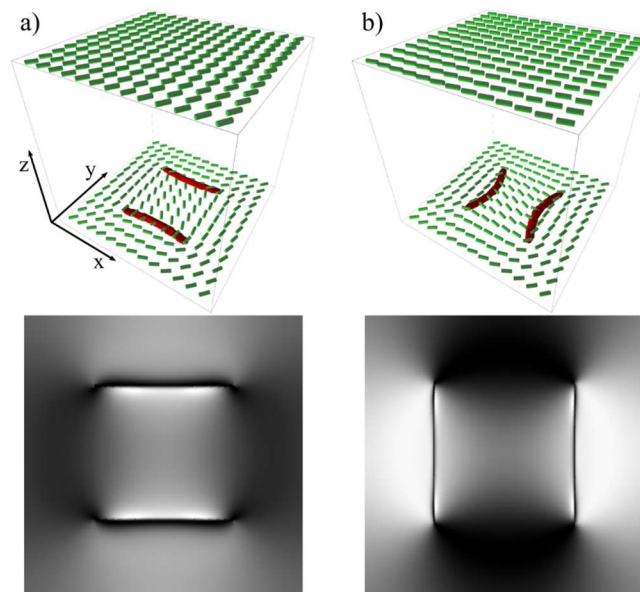


Slika 4: Vsiljevanje dveh defektov z $|m| = 1/2$ na spodnji mejni površini, kjer imata defekta a) enak predznak, b) nasprotna predznaka in c) nasprotna predznaka z medsebojno razdaljo $d_s < 2h$. Zgoraj so strukture, spodaj pa slike pod prekrižanima polarizatorjema.

Vir: lasten.

3.3 Mreže defektov z $|m| = 1/2$ ali $|m| = 1$

Z večanjem števila defektov na spodnji mejni površini lahko hitro povečamo kompleksnost ravnovesnih struktur v sistemu. Število mogočih kombinacij je neskončno in pri tem jih lahko razporedimo enakomerno ali neenakomerno. Mi se bomo osredotočili na razporeditve defektov v kvadratne mreže, kjer ima vsak defekt na mejni površini za najbližjega soseda defekt z nasprotnim predznakom. V primeru 2×2 kvadratne mreže imamo 4 defekte z $|m| = 1/2$, ki so vsi postavljeni v oglišča kvadrata. In ker so postavljeni alternirajoče (stranice kvadrata povezujejo defekte z nasprotnim predznakom) in na razdalji $d_s < 2h$, se defekti med seboj povežejo in sta mogoči dve ravnovesni stanji, ki sta si energijsko enakovredni (slika 5).

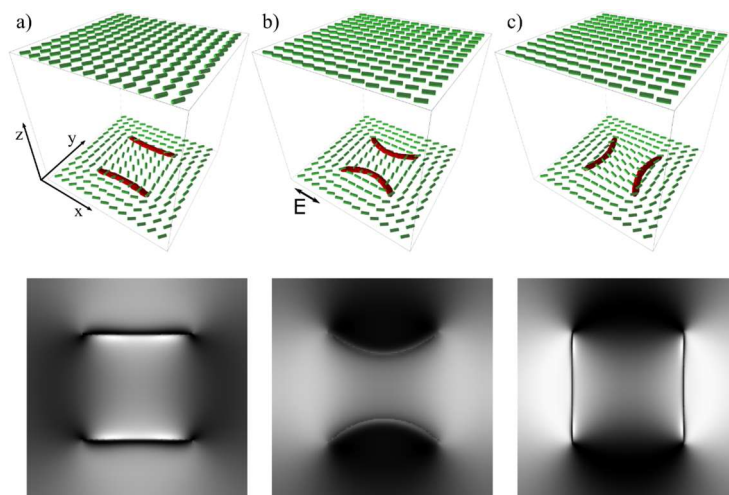


Slika 5: Dve energijsko enakovredni ravnovesni stanji. Zgoraj sta strukturi, spodaj pa sliki pod prekrižanima polarizatorjema.

Vir: lasten.

Sistem, ki je prikazan na sliki 5, je primer multistabilnega sistema, kjer je več ravnovesnih stanj, ki so si energijsko enakovredna in posledično je za sistem vseeno, v katerem od obeh stanj je. Če defekti ne bi bili razporejeni v oglišča kvadrata (namesto tega na primer v oglišča pravokotnika), bi se ta enakovrednost porušila in bi eno stanje postalo energijsko bolj ugodno. To enakovrednost lahko porušimo tudi

z zunanjim \mathbf{E} . Disklinacije imajo težnjo usmeritvi pravokotno na smer \mathbf{E} (Harkai in ostali, 2020) in če imamo zunanji \mathbf{E} vzdolž x osi, potem bo za sistem energijsko ugodneje imeti disklinacije vzdolž y osi. Na tak način lahko tudi induciramo prehod med tema dvema stanjema in prevežemo disklinacije. Ko postavimo sistem z dvema nenabitima disklinacijama vzdolž x osi (slika 6 a) in vzpostavimo zunanji \mathbf{E} tudi vzdolž x osi, se obe disklinaciji najprej upogneta (slika 6 b) in medsebojno približata, potem pa prevežeta tako, da potekata vzdolž y osi (slika 6 c).

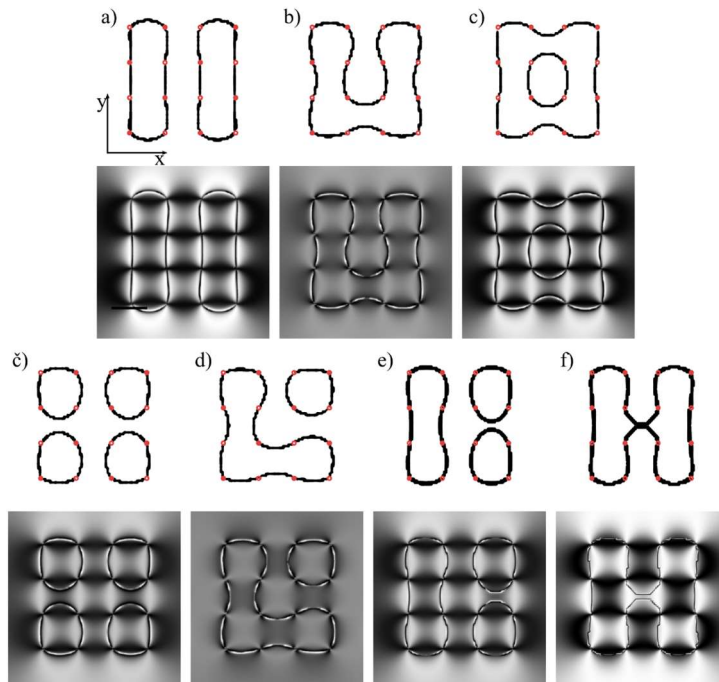


Slika 6: Prevezovanje disklinacij s pomočjo zunanjega polja \mathbf{E} . Zgoraj so strukture, spodaj pa slike pod prekrizanimi polarizatorjema.

Vir: lasten.

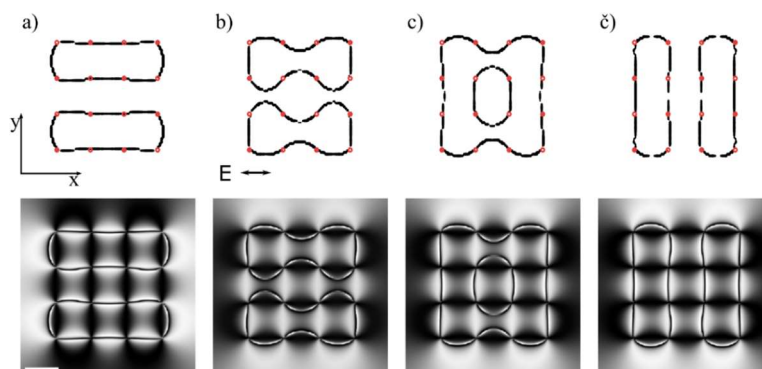
Za bolj kompleksne mreže obstaja več različnih ravnovesnih stanj, kajti defekti na spodnji mejni površini imajo takrat lahko več najbližjih sosedov, med katerimi lahko izbirajo za povezave. Kompleksnost lahko preprosto povečamo tudi z vsiljevanjem defektov z $|m| = 1$ namesto z $|m| = 1/2$. Tako za 4×4 mrežo enakomerno razporejenih defektov z $|m| = 1$ na spodnji površini obstaja 18 ravnovesnih stanj, od katerih jih je kvalitativno različnih 7 in ostali dobimo z zrcaljenjem ali vrtenjem le-teh 7 (slika 7). Ker slike teh kvalitativno različnih ravnovesnih stanj spominjajo na črke, smo jih tako tudi poimenovali (razvrščeni so glede na to, kako stabilno je posamezno ravnovesno stanje, od najbolj do najmanj stabilnega): v a) je [II], v b) je [U], v c) je [O], v č) je [oooo], v d) je [Lo], v e) je [Ioo] in v f) je [H]. Vsi vzorci so (meta)stabilni in imajo v splošnem različne energije, vendar so bile te razlike v

skupnih energijah med vsemi ravnovesnimi stanji manjše od 1%, zaradi česar lahko obravnavamo sistem kot multistabilen.



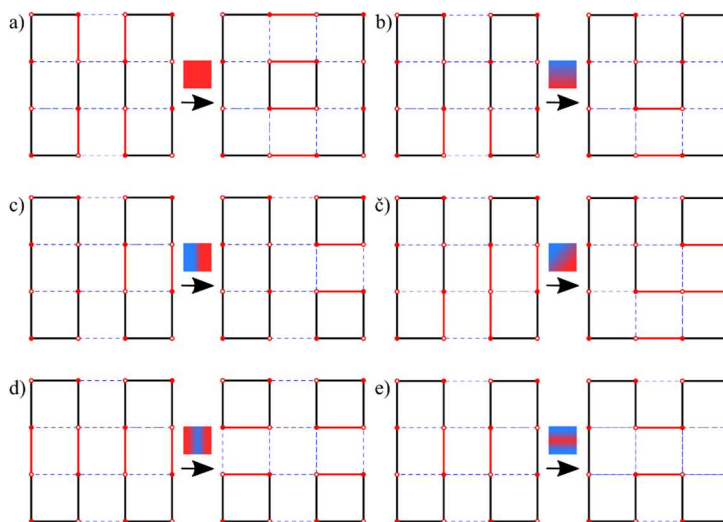
Slika 7: Sedem različnih ravnovesnih stanj v sistemu z 4x4 mrežo alternirajočih defektov na spodnji mejni površini, ki so a) [II], b) [U], c) [O], č) [oooo], d) [Lo], e) [Ioo] in f) [H]. Zgornje slike so strukture, spodnje pa slike pod prekržanimi polarizatorjema. Polni rdeči krogi so lege defektov z $m = 1$ na spodnji mejni površini, prazni pa lege defektov z $m = 1$. Vir: lasten.

Tako kot v sistemu z 2x2 mrežo lahko uporabimo zunanji \mathbf{E} za prevezovanje defektov. Podobno kot v primeru z 2x2 mrežo lahko začnemo s poljubnim ravnovesnim stanjem, mi bomo uporabili vzorec [II], le rotiran za 90° (slika 8 a). Ob vzpostavitvi zunanjega \mathbf{E} vzdolž x osi se disklinacije upognejo (slika 8 b), pri $\mathbf{E} > \mathbf{E}_c$ se pa po dva para disklinacij prevezeta, najprej v levi in desni sredini (slika 8 c), potem pa še v zgornji in spodnji sredini (slika 8 č). Tako na koncu dobimo enako stanje kot je bilo začetno, le da je zdaj spet enako stanje kot v sliki 7 a.



Slika 8: Prevezovanje disklinacij z uporabo zunanega polja E . a) začetno stanje, ki je vzorec [II], b) upogib disklinacij v šibkem c) prevez dveh parov disklinacij in nastali vzorec [O], č) končno stanje, ki je spet vzorec [II], le rotiran za 90° . Zgornje slike so strukture, spodnje pa slike pod prekrizanimi polarizatorjema.

Vir: lasten.



Slika 9: Shematski prikaz prevezovanja disklinacij z uporabo zunanega polja E , katerega jakost je prostorsko odvisna. Začetni vzorec je [II], končni pa a) [O], b) [U], c) [I00], č) [Lo], d) [000], in e) [H]. V kvadratih nad puščicami je prikazana jakost $E(x,y)$, kjer modra barva označuje šibki $E < E_c$, rdeča pa $E > E_c$.

Vir: lasten.

S prostorsko homogenim zunanjim \mathbf{E} lahko efektivno induciramo prehode med nekaterimi ravnovesnimi stanji, prikazanimi v sliki 7. Če pa vzpostavimo \mathbf{E} , katerega jakost je prostorsko odvisna, lahko induciramo prehod v poljubno ravnovesno stanje. Če izhajamo iz vzorca [II], lahko s homogenim \mathbf{E} prevežemo disklinacije v vzorec [O], kot smo pokazali na sliki 8 (slika 9 a). Če vzpostavimo tak \mathbf{E} , da se vzdolž y osi linearno zmanjšuje, pa lahko dobimo vzorec [U] (slika 9 b), za vzorec [Ioo] je potrebno spreminjanje vzdolž x osi (slika 9 c), za vzorec [Loo] linearno spreminjanje po diagonali, na primer $x = -y$ (slika 9 č), za vzorec [oooo] zmanjšamo jakost \mathbf{E} v sredini med zankama vzorca [II] (slika 9 d), in za vzorec [H] pa potrebujemo samo ozek pas močnejšega \mathbf{E} v sredini vzorca vzdolž x osi (slika 9 e).

4 Zaključek

V tem delu smo numerično obravnavali vsiljevanje in manipulacijo topoloških defektov v tekočem kristalu z uporabo ustreznih pogojev na mejni površini in zunanjega polja. Osredotočili smo se na planparalelne celice, kjer smo z robnimi pogoji vsilili defekte v sistem in jih potem manipulirali z električnim poljem. Sistem smo opisali z Landau – de Gennesovim mezoskopskim modelom, kjer smo ureditev predstavili z brezslednim simetričnim tenzorjem ureditvenega parametra. Minimizarali smo prosto energijo, da smo pridobili diferencialne enačbe, ki smo jih numerično reševali. Rezultate smo prikazali s profilom dvoosnosti, direktorskega polja in simuliranimi slikami pod prekrizanimi polarizatorjema.

Z vsiljevanjem defekta z $m = 1$ na spodnji mejni površini smo pokazali, da je mogočih več različnih ravnovesnih stanj in da je določitev najbolj ravnovesnega stanja odvisna od debeline celice h . Tako so mogoče strukture v celici po vrsti glede na h od najtanjše do najdebelejše celice: nerazcepljen defekt ($h < 5\xi_b$), razcepljen defekt, ki se razcepi na dva defekta z $m = 1/2$ ($h = 5\xi_b$), in pobegla struktura, ki se izogne defektu s pobegom v tretjo dimenzijo ($h = 50\xi_b$). Vse te strukture se raztezajo med obema mejnima površinama. Če smo v sistemu z negativno dielektrično anizotropijo vzpostavili zunanje polje \mathbf{E} vzdolž z osi, smo lahko inducirali prehod iz pobegle v razcepljeno preko nerazcepljene strukture.

Z vsiljevanjem več kot enega defekta na spodnji mejni površini smo lahko razširili možnosti različnih interakcij. Pokazali smo, da lahko topološke defekte obravnavamo kot elektrostatične monopole, kjer se monopoli z enakim predznakom

odbijajo, z nasprotnim pa privlačijo. Na podoben način smo prikazali tudi anihilacijo dveh defektov, če sta bila na dovolj majhni razdalji, in nastanek disklinacije brez naboja ali zanke, ki povezuje dva defekta z nasprotnima predznakoma na mejni površini.

Z vsiljevanjem mrež defektov na spodnji mejni površini smo lahko ustvarili multistabilne sisteme, ki imajo več kot eno ravnovesno stanje. V primeru 2×2 mreže ima sistem dve enakovredni ravnovesni stanji, med katerima lahko poljubno preklapljammo z zunanjim \mathbf{E} vzdolž smeri nenabitih zank. V primeru 4×4 mreže ima sistem 7 kvalitativno različnih in skupno 18 različnih ravnovesnih stanj. V takem sistemu lahko tudi poljubno preklapljammo med ravnovesnimi stanji z uporabo \mathbf{E} , kjer s primerno izbiro prostorsko odvisne jakosti \mathbf{E} lahko preidemo v poljubno ravnovesno stanje.

Ti rezultati bi lahko bili uporabni v raznih aplikacijah, specifično v elektroptičnih, fotoničnih ali nanotehnoloških napravah, kjer bi različna ravnovesna stanja vplivala na lastnosti in obnašanje sistema. Na primer, defekte bi lahko uporabili kot učinkovite pasti za primerne nanodelce (Kikuchi idr., 2002; Coursault idr. 2012; Wang idr., 2016), ki bi vnesli električno prevodnost in s induciranjem prehoda v drugo ravnovesno stanje bi sistem lahko bil prevoden na drugačen način, s čimer bi lahko ustvarili kompleksno mrežo prevodnih nanožičk. Poleg tega bi ti prevezljivi defekti prikazovali splošno obnašanje narave. S predpostavko, da so temeljni gradniki polja (Hobson, 2013) in ne delci, bi lahko topološki defekti predstavljali osnovne delce (Skyrme, 1962), nenabite zanke pa bi predstavljale analog Majoranovim delcem (Wilczek, 2009), ki so sami sebi antidelci.

Literatura

- Bisi, F., Garland, E. C., Rosso, R., in Virga, E. G., 2003. Order reconstruction in frustrated nematic twist cells. *Phys. Rev. E* 68, 021707.
- Chesler, P. M., García-García, A. M., in Liu, H. (2015). Defect Formation Beyond Kibble-Zurek Mechanism and Holography. *Phys. Rev. X* 5, 021015.
- Coursault, D., Grand, J., Zappone, B., Ayeb, H., Levi, G., Féliđj, N. in Lacaze, E., 2012. Linear self-assembly of nanoparticles within liquid crystal defect arrays. *Adv. Mater.* 24, 1461.
- De Gennes, P. G., in Prost, J., 1994. *The Physics of Liquid Crystals*. Clarendon Press.
- Goldstein, D. H., 2010. *Polarized Light*, third ed., CRC Press.
- Harkai, S., Murray, B. S., Rosenblatt, C. in Kralj, S., 2020. Electric field driven reconfigurable multistable topological defect patterns. *Phys. Rev. Res.* 2, 013176.
- Hobson, A. (2013)., There are no particles, there are only fields. *Am. J. Phys.* 81, 211.
- Karatairi, E., Rožič, B., Kutnjak, Z., Tzitzios, V., Nounenis, G., Cordoyiannis, G., Thoen, J., Glorieux, C., in Kralj, S., 2010. Nanoparticle-induced widening of the temperature range of liquid-crystalline blue phases, *Phys. Rev. E* 81, 041703 (2010).
- Kikuchi, H., Yokota, M., Hisakado, M., Yang, H., in Kajiyama, T., 2002. Polymer-stabilized liquid-crystals blue phases. *Nat. Mater.* 1, 64.
- Kralj, S., Virga, E. in Žumer, S., 1999. Biaxial torus around nematic point defects. *Phys. Rev. E* 60, 1858.
- Kralj, S., Murray, B. S. in Rosenblatt, C., 2017. Decomposition of strongly charged topological defects. *Phys. Rev. E* 95, 042702.
- Liu, Q., Chui, Y., Gardner, D., Li, X., He, S. in Smalyukh, I. I., 2010. Self-alignment of plasmonic gold nanorods in reconfigurable anisotropic fluids for tunable bulk metamaterial applications. *Nano Lett.* 10, 1347.
- Mermin, N. (1979). The topological theory of defects in ordered media. *Rev. Mod. Phys.* 51, 591.
- Marrucci, L., Manzo, C., in Paparo, D., 2006. Optical Spin-to-Orbit Angular Momentum Conversion in Inhomogeneous Anisotropic Media. *Phys. Rev. Lett.* 96, 163905.
- Murray, B. S., Pelcovits, R. A. in Rosenblatt, C., 2014. Creating arbitrary arrays of two-dimensional topological defects. *Phys. Rev. E* 90, 052501.
- Nehring, J. in Saupe, M., 1972. On the schlieren texture in nematic and smectic liquid crystals. *J. Chem. Soc., Faraday Trans. 2* 68, 1.
- Pires, D., Fleury, J. B. in Galerne, Y., 2007. Colloid Particles in the Interaction Field of a Disclination Line in a Nematic Phase. *Phys. Rev. Lett.* 98, 247801.
- Ravnik, M. in Žumer, S. 2009. Landau–de Gennes modelling of nematic liquid crystal colloids, *Liq. Cryst.* 36, 1201.
- Skyrme T. (1962)., A unified field theory of mesons and baryons. *Nucl. Phys.* 31, 556.
- Stannarius, R. in Harth, K., 2016. Defect Interactions in Anisotropic Two-Dimensional Fluids. *Phys. Rev. Lett.* 117, 157801.
- Susser, A. L., Harkai, S., Kralj, S. in Rosenblatt, C., 2020. Transition from escaped to decomposed nematic defects, and vice versa. *Soft Matter* 16, 4814.
- Svenšek, D. in Žumer, S. 2004. Instability modes of highstrength disclinations in nematics. *Phys. Rev. E* 70, 061707.
- Wilczek F. (2009), Majorana returns, *Nat. Phys.* 5, 614.
- Wang, X., Miller, D. S., Bukusoglu, E., De Pablo, J. J., in Abbott, N. L., 2016. Topological defects in liquid crystals as templates for molecular self-assembly. *Nat. Mater.* 15, 106.
- Yoshida, H., Asakura, K., Fukuda, J. in Ozaki, M., 2015. Threedimensional positioning and control of colloidal objects utilizing engineered liquid crystalline networks. *Nat. Commun.* 6, 7180.