

Dynamik von Disklinationen in anisotropen Fluiden

Von der Fakultät Physik der Universität Stuttgart
zur Erlangung der Würde eines
Doktors der Naturwissenschaften (Dr. rer. nat.)
genehmigte Abhandlung

von
MICHAEL REICHENSTEIN
aus Waiblingen

Hauptberichter: Prof. Dr. H.-R. Trebin
Mitberichter: Prof. Dr. H. Herrmann

Tag der mündlichen Prüfung: 18. Juli 2002

Institut für Theoretische und Angewandte Physik
Universität Stuttgart
2002

Inhaltsverzeichnis

Symbolverzeichnis	v
Summary	vii
Einleitung	1
1 Anisotrope Fluide	5
1.1 Der nematische Ordnungsparameter	6
1.2 Räumliche Variationen des Ordnungsparameters	13
1.3 Defekte und Disklinationen	16
1.4 Hydrodynamik des Direktors	20
2 Hydrodynamik des Ausrichtungstensors	23
2.1 Die dynamischen Gleichungen	23
2.2 Die verschiedenen Anteile der freien Energie	28
2.3 Vergleich mit den Leslie-Ericksen-Gleichungen	30
2.4 Vergleich mit den Gleichungen einer isotropen Flüssigkeit	32
2.5 Zusammenfassung der dynamischen Gleichungen	33
3 Skalierung und numerische Aspekte	35
3.1 Skalierung der freien Energie	36
3.2 Einführung der Reynoldszahl	39
3.3 Lösung des Druckproblems	42
3.4 Das diskretisierte Gleichungssystem	44
3.5 Randbedingungen	45
4 Disklinationsdynamik im Direktorbild	49
4.1 Die Multidomänenzelle	49
4.2 Die Multidomänenzelle als Displaypixel	56
4.3 Die Multidomänenzelle als Mini-Defektlabor	59
5 Übergang zum Ausrichtungstensor	67
5.1 Dünne Filme	67
5.2 Der Eigenwertübergang	69

6	Disklinationsdynamik im Ausrichtungstensorbild	77
6.1	Annihilation von Defekten	77
6.2	Disklinationen im Q -Tensorbild	79
6.3	Die homogene Strömung	83
6.4	Anströmen des Disklinationskerns	86
	Zusammenfassung und Ausblick	95
	Anhang	97
A	Vollständige zeitliche Ableitung der freien Energie . . .	97
B	Der Standardparametersatz	101
C	Visualisierung	103
	Literaturverzeichnis	105
	Verzeichnis der Abbildungen, Boxen und Tabellen	112

Symbolverzeichnis

Dies ist eine Zusammenstellung einiger häufig gebrauchter Symbole. Für eine genauere Erläuterung sei auf die jeweiligen Abschnitte verwiesen, in denen die Größen eingeführt werden.

Falls nicht in Komponenten angegeben, werden Vektoren fett gesetzt: \mathbf{n} , \mathbf{v} . Tensoren werden ebenfalls fett gesetzt, jedoch ohne Serifen: \mathbf{Q} , \mathbf{K} . Physikalische Einheiten werden ohne Serifen gesetzt: m , $\frac{\text{g}}{\text{cm}^3}$. Vollständige zeitliche Ableitungen werden als $\frac{d}{dt}\phi = \dot{\phi}$ geschrieben. Bei partiellen Ableitungen von skalaren Größen ϕ nach der Raumrichtung x_α schreiben wir $\frac{\partial}{\partial x_\alpha}\phi = \partial_\alpha\phi = \phi_{,\alpha}$ und verwenden durchgehend griechische Indizes für die Koordinatenrichtungen. Handelt es sich um Vektoren, so gilt z.B. $\frac{\partial}{\partial x_\alpha}v_\beta = \partial_\alpha v_\beta = v_{\beta,\alpha}$.

Variablen und Parameter

$\mathbf{1}$	Einheitsmatrix
b	Kantenlänge der Simulationsbox
c_i	Elastische Konstanten der Landau-Energie
d	Plattenabstand
d_{krit}	Kritischer Plattenabstand
F	Freie Energie
f_{ges}	Gesamte freie Energiedichte
f_{bulk}	Freie Energiedichte, Volumenanteil
f_{elast}	Freie Energiedichte, elastischer Anteil
f_{elek}	Freie Energiedichte, elektrischer Anteil
f_{chiral}	Freie Energiedichte, chiraler Anteil
$H_{\alpha\beta}$	Molekularfeld
$K_{\alpha\beta}$	<i>corotational derivative</i> von $Q_{\alpha\beta}$
k_{ij}	Elastische Konstanten der Frank-Oseen-Energie
M_{biax}	Biaxialitätsmaß
n_α	Direktor
p	Hydrostatischer Druck
p_0	Intrinsischer cholesterischer Pitch

$Q_{\alpha\beta}$	Tensorieller Orientierungsordnungsparameter
Re	Reynoldszahl
St_1	Stelzerzahl
St_2	Starkzahl
s	Defektstärke
t	Reduzierte Temperatur in der Landau Energie
$V_{\alpha\beta}$	Geschwindigkeitsgradient
α_i	Viskositäten in der Leslie-Ericksen-Theorie
$\delta_{\alpha\beta}$	Kronecker-Symbol
$\epsilon_{\alpha\beta}$	Dielektrizitätstensor
$\epsilon_{\alpha\beta\gamma}$	Vollständig antisymmetrischer Tensor
$\gamma, \tilde{\gamma}$	Rotationsviskositäten in der Leslie-Ericksen-Theorie
ρ	Dichte
$\sigma_{\alpha\beta}$	Spannungstensor
$\sigma_{\alpha\beta}^{\text{elast}}$	Elastischer Anteil des Spannungstensors
$\sigma_{\alpha\beta}^{\text{irr}}$	Viskoser Anteil des Spannungstensors
ϕ	Elektrische Spannung
φ_p	Pretilt der MD-Zelle
θ	Entropiedichte
ϑ_p	Pretwist der MD-Zelle
ϑ_p^D	Kritischer Pretwist der MD-Zelle
$\mu_{\alpha\beta}$	Skalierter Tensor-Ordnungsparameter
ν_1, ν_2	Viskositäten in der Tensordynamik
ν_3	Kinetischer Koeffizient in der Tensordynamik
ξ_R	Kohärenzlänge

Summary

Liquid crystals are very particular materials. Although being fluids, they reveal an anisotropy of physical properties, caused by a long-range orientational order of the molecules. Some liquid crystalline phases additionally exhibit a certain degree of positional order, thus a huge number of phase transitions can occur¹.

Many liquid crystalline phases are stable at room temperature and their characteristic length scales are in the wavelength range of visible light. These properties allow the construction of liquid crystal displays, where the transmission of light is controlled by applying an electric voltage and thus influencing the orientational order via its coupling to the dielectric anisotropy.

In the orientational order, singularities can occur. Linear singularities (line defects), are called *disclinations* in analogy of the name *dislocations* for defects in crystals. Disclinations in nematic liquid crystals are very similar to vortices in superfluids and to cosmic strings in quantum-theoretical vacuum fields, but they are much more easily accessible to the experiment.

In this work we investigate the dynamic properties of disclinations: the motion, creation and annihilation of entire line defects as well as the friction force on the defect core. For this purpose we set up the hydrodynamic equations for a tensorial order parameter which allows us to correctly represent the core of the disclinations. In addition to the well-known Navier-Stokes-Equation of the liquid, we obtain an angular momentum equation for the orientational degree of freedom.

Theory of the Nematic Order Parameter (Chapter 1)

The orientational order of nematic liquid crystals is described by a symmetric and traceless tensor of second rank, the order parameter \mathbf{Q} . The expansion of the free energy in terms of \mathbf{Q} up to fourth order yields a bulk energy F_{bulk} , which can be used to study phase transitions. At the minimum of the bulk energy, the order parameter is degenerated to the projective plane and \mathbf{Q} can be written as $\mathbf{Q} = \frac{3}{2}S(\mathbf{n} \otimes \mathbf{n} - \frac{1}{3}\mathbf{1})$. The molecules align along an easy axis \mathbf{n} , the so-called director. $\frac{3}{2}S$ describes the degree of disalignment: $S = 0$ corresponds to the isotropic, $\frac{3}{2}S = 1$ to the ideal nematic phase, *i.e.*, a parallel alignment of all molecules.

¹To maintain the readability of this small summary, we do not repeat the references to literature, expressions and figures, which can be found in chapter 1–6.

Spatial variations of the order parameter are taken into account by the elastic energy F_{elast} . For the typical length scale of liquid crystal displays, the elastic energy is very small compared to the bulk energy and can be considered as a perturbation.

This is not true anymore in the core of disclination lines. The variations of the order parameter take place on very short distances (≈ 10 nm), thus the elastic energy is no longer small and becomes comparable to the bulk energy: the \mathbf{Q} tensor exhibits biaxial states, the alignment along a secondary axis perpendicular to the main director \mathbf{n} becomes important.

To quantitatively register the biaxiality, we introduce a measure of biaxiality M_{biax} , which is zero for prolate and oblate uniaxial order parameters and tends towards one in the limit of biaxial states.

Hydrodynamics of the Alignment Tensor (Chapter 2)

The hydrodynamic equations for the director \mathbf{n} are known as Leslie-Ericksen theory. In this work we study the corresponding equations for the tensorial order parameter. We derive them in three steps: first the entropy production rate is set up. Then we identify the conjugate forces (the velocity gradients and the molecular field) and fluxes (the stress tensor and the corotational derivative of \mathbf{Q}).

Viscosities are introduced as coefficients in the expansion of the forces in terms of the fluxes. The result is a Navier-Stokes equation and a dynamic equation for the order parameter (angular momentum balance). The elastic and viscous parts of the order parameter field couple to the velocities via the stress tensor. The angular momentum equation, on the other hand, contains the gradients of the velocity as well.

Scaling and Numeric Aspects (Chapter 3)

To work out the basic properties of the set of equations previously derived, we combine the conventional scaling of the Navier-Stokes equation (yielding a Reynolds number) with the scaling of the free energy according to HORNREICH.

The scaling of the free energy density is based on the characteristic length b (*e.g.* the dimension of a display pixel). We express b in terms of the coherence length ξ_R , *i.e.*, the intrinsic length scale, where the liquid crystalline order decays. Thus we obtain

$$f_{\text{ges}} = f_{\text{bulk}} + \frac{\xi_R^2}{b^2} f_{\text{elast}} .$$

The ratio between the volume and the elastic energy, which depends on the length scale b , is now clearly visible and will be investigated in the vicinity of thin films (Chapter 5).

The properties of the hydrodynamic equations can be reduced to four characteristic numbers. These are:

- the Reynolds number Re (the ratio between the kinetic and viscous flow energy),
- the ratio St_2 between the viscous rotational energy and the elastic energy, both of them being related to the liquid crystalline order,
- a mixed ratio St_1 between the viscous flow energy and the elastic energy of the liquid crystalline order, and
- the kinetic coefficient ν_3 .

The rescaled set of equations is solved numerically by finite element and finite difference methods. As boundary conditions for the \mathbf{Q} tensor we employ the uniaxial bulk value, which is calculated from a configuration of minimum bulk energy at a given temperature.

The Multidomain Cell (Chapter 4)

The multidomain cell provides a simple solution for one of the major problems of liquid crystalline displays (LCD): the contrast of conventional LCDs based on the twisted nematic (TN) cell strongly depends on the viewing angle. In this TN cell the molecules at the two confining cover glasses are anchored parallel to the surface and enclose an angle of 90 degrees. Therefore, the director forms a helix structure.

By slightly tilting the molecules at the surface, the twisting sense of the helix can explicitly be chosen to be left or right handed. In a multidomain cell (we use the version of SCHADT *et al.*) left and right handed helices alternate like on a checkerboard pattern. Since helices of opposite twisting sense do not match, line defects appear.

Static investigations allow the derivation of a configuration phase diagram as function of the tilt angle ϑ_p of the director at the surface (measured from the surface normal) and the applied voltage U_0 . For small

values of ϑ_p a defect-free configuration occurs since two helices reverse their twisting sense due to a process denoted *splay canceling*.

Due to the complex geometry of the MD cell, we reduce our set of equations to a pure rotational dynamics by discarding the velocity field. We simulate two different switching processes of the MD cell. One of them mimics the application of the MD cell in displays, where disclinations are always present. The other switching process can be used to study the creation and annihilation of disclinations.

We calculate the transmission of light by a 2×2 Jones matrix formalism. To achieve more detailed information on the disclination lines, a small Burgers circuit is performed on each plane formed by four grid points. If a closure deficiency remains, the plane is marked in its center by a small sphere. By carrying out this procedure for each time step, we produce a movie of the disclination line motion in space.

For the switching process in display applications we find that the switching time is somewhat faster close to the disclination lines. At some distance from the line defects, there is no difference in switching time compared to a conventional TN cell. The process of switching on is the reverse process of switching off.

For investigating the creation and annihilation of disclinations we start with a defect-free configuration. During the switching process, two of the four domains reverse their twisting sense. This is possible by the nucleation of ring disclinations. First the liquid crystal reacts to the applied electric voltage by aligning the directors parallel to the field. Ring disclinations open up where boundary conditions of opposite direction meet. When they are large enough to meet, they recombine and two disclination lines remain close to the surfaces, which distinguish the helices of left and right handed twisting sense.

When the voltage is turned off again, the order parameter field relaxes according to the elastic torques. The disclinations move from the surfaces to the center of the cell. There, again, a recombination takes place. In the following, two of the domains turn their twisting sense, thus yielding a homogeneous configuration.

Properties of Thin Films (Chapter 5)

To achieve insight into the biaxial degree of freedom, we investigate the static configurations in thin films. The liquid crystal is confined by two parallel surfaces at $z = 0$ and $z = d$. The order parameter at the

surfaces is chosen uniaxial: $\mathbf{Q} = \frac{3}{2}S(\mathbf{n} \otimes \mathbf{n} - \frac{1}{3}\mathbf{1})$. On the upper surface \mathbf{n} is fixed along the y axis and on the lower surface along the x axis.

The finite element method is used to minimize the sum of the reduced bulk and elastic free energy in the volume between the surfaces. The distance d is given in terms of the coherence length $\xi_R \approx 14$ nm. In the limit of large distances $d \gg \xi_R$, a director helix results, with all \mathbf{Q} tensors uniaxial. This helix can be compared to the director helix in the MD cell (see above).

In the following, the system is shrunk: the order parameter remains fixed on the surfaces while we systematically reduce the distance d ($b = d$ in rescaled free energy). With progressive shrink, the distortion of the helix has to occur on a shorter and shorter length, and the elastic energy is raising. In the rescaled free energy this behavior is expressed by the factor ξ_R^2/d^2 (see above). When $d \approx \xi_R$ both energies becomes comparable. If all elastic constants would be equal to one, the energies would be of same value for $b = \xi_R$. We find, that the separation of the surfaces, where elastic and volume energy are equal, depends linearly on the twist elastic constant: $d_{\text{krit}} \propto k_{22}$.

At a distance $d \approx 2.5\xi_R$ the elastic energy is already large enough to induce biaxiality, but the helix structure is still present. Between $d = 1.5\xi_R$ and $d = 2.0\xi_R$ a fundamental change of the configuration takes place.

The rotation of the main axis of the tensorial order parameter is completely removed and replaced by an eigenvalue transition: from one surface, the biaxiality grows until its maximum is reached at $z = d/4$. Then it reduces again to the oblate uniaxial state at $z = d/2$. The same transition takes place between $z = d/2$ and $z = d$. This change is due to the fact, that the bulk energy is identical to elastic energy at the transition distance d_{krit} . The configuration is governed by the elastic energy for $d > d_{\text{krit}}$ and by the bulk energy for $d < d_{\text{krit}}$.

Friction Force on a Disclination Core (Chapter 6)

We finally apply the hydrodynamic equations of the tensorial order parameter to the core of a disclination line. We restrict our simulation to defect lines of strength $s = \pm\frac{1}{2}$.

To obtain the static order parameter field of the disclination lines, we employ the analytical expression for its uniaxial version to the boundaries in the x - z plane. Periodic boundaries are used along the disclination

line, which is parallel to the z axis. The finite element method is used to minimize the free energy in the bulk. The result is an oblate uniaxial center of the core, surrounded by a ring of maximum biaxiality. The field outside the core remains prolate uniaxial.

The boundary conditions are then changed for the dynamic simulations. The boundary values in the x - z plane are extrapolated from the bulk, thus providing open boundary conditions. At $z = 0$ and $z = b$ (called plates in the following) we fix the rescaled velocity to $\mathbf{v}^0 = (0, 1, 0)^T$. During the temporal development of the hydrodynamic equations the velocity of the plates is transferred to the bulk. We investigate the center of the cell ($z = b/2$), where the influence of the boundaries is vanishing and the undisturbed velocity field is adjusting.

For this central layer we plot the streamlines and the divergence of the stress tensor. Via Gauss's theorem we calculate the friction force per unit length of the disclination line. The result is a negative friction force, which points into the opposite direction of the velocity field. The friction force of the positive defect is by a factor $3/2$ larger than that of the negative defect.

Einleitung

Kein anderes Gebiet in der Physik der kondensierten Materie weist eine derart große Vielfalt von Phasenübergängen auf, wie jenes der Flüssigkristalle. Woher kommt diese Vielfalt? Wie bereits der zusammengesetzte Name andeutet, vereint diese Stoffklasse das Fließverhalten von Flüssigkeiten mit Eigenschaften, die sonst nur Kristalle aufweisen. Während sich die Schwerpunkte der Flüssigkristallmoleküle frei gegeneinander bewegen dürfen, können sich ihre Achsen ausrichten. Phasenübergänge finden also nicht nur zwischen unterschiedlichen Positionsordnungen statt (z.B. fest \leftrightarrow flüssig), sondern auch zwischen unterschiedlichen Orientierungsordnungen der Moleküle (z.B. flüssig-isotrop \leftrightarrow flüssig-nematisch).

Auf diesen Orientierungsordnungen beruht letzten Endes auch der Siegeszug der Flüssigkristalle im Bereich der Bildschirmtechnologie: Viele der charakteristischen Längenskalen liegen im Wellenlängenbereich des sichtbaren Lichtes. Darüber hinaus weisen eine Vielzahl von Stoffen flüssigkristalline Phasen bei Zimmertemperatur auf. So kann durch das Anlegen eines elektrischen Feldes die Orientierungsordnung und in Folge dessen die Wechselwirkung mit sichtbarem Licht beeinflusst werden. Damit ist es möglich, einen hinsichtlich des Energieverbrauchs und des Platzbedarfs sparsamen Bildschirm zu bauen.

Flüssigkristalle sind auch noch von einem anderen Standpunkt aus sehr interessant. Ihre topologischen Eigenschaften sind vergleichbar mit denen von suprafluidem Helium [1, 2], Supraleitern [3, 4], aber auch des quantenfeldtheoretischen Vakuums [5, 6, 7, 8].

Ähnlich den Versetzungen in kristallinen Festkörpern können im Orientierungsordnungsfeld Singularitäten auftreten, sogenannte Defekte². Sie entstehen z.B. beim Abkühlen aus der ungeordneten isotropen Phase, wenn sich an verschiedenen Orten spontan eine höhere Ordnung einstellt. Treffen zwei Gebiete unterschiedlicher Ausrichtung aufeinander, so kommt es an der Grenzfläche zur Ausbildung von Defekten, falls die lokalen Ordnungen nicht kompatibel zueinander sind.

Im Rahmen der topologischen Theorie der Defekte [9, 10, 11] wurde eine einheitliche Klassifikation der Defekte aufgrund von Symmetrie- und Topologie-Eigenschaften vorgenommen und damit die Verbindung zu Wirbeln in Supraleitern und suprafluidem Helium sowie den kosmi-

²Linienförmige Defekte werden in Anlehnung an *Dislokationen* auch als *Disklinationen* bezeichnet

schen Strings hergestellt. Während diese Systeme nur unter extremen experimentellen Bedingungen (tiefe Temperaturen bzw. hohe Magnetfelder), oder — wie im Fall der kosmischen Strings — überhaupt nicht zugänglich sind, können in Flüssigkristallen sämtliche Phänomene nahezu bei Raumtemperatur beobachtet werden.

Von besonderem Interesse ist hierbei, wie die Nukleation von Defekten die Dynamik des Phasenüberganges bestimmt. Während sich das Interesse in den vergangenen Jahren hauptsächlich auf das Skalenverhalten [12] und den Einfluss von Fluktuationen [13] richtete, wird in letzter Zeit vermehrt die Hydrodynamik von Phasenübergängen studiert. Dabei kommen insbesondere Computersimulationen zum Einsatz, die es ermöglichen, den vollen Satz von hydrodynamischen Gleichungen zu lösen und die Kopplung der flüssigkristallinen Orientierungsordnung an das Geschwindigkeitsfeld in der nematischen Phase [14, 15, 16, 17] sogar während des Phasenübergangs [18, 19] zu untersuchen. Die Orientierungsordnung wirkt dabei auf die Fließgeschwindigkeiten über elastische und viskose Terme im Spannungstensor der Navier-Stokes-Gleichung. Umgekehrt finden sich Gradienten des Geschwindigkeitsfeldes in der Drehimpulsbilanz, der dynamischen Gleichung für die Orientierungsordnung.

Ziel der vorliegenden Arbeit

Um die Rolle von Defekten beim Phasenübergang besser zu verstehen, beschäftigen wir uns in dieser Arbeit mit den dynamischen Eigenschaften von Defektlinien.

Mit der Multidomänenzelle, die ursprünglich zur Verbesserung der Qualität von Bildschirmen entwickelt wurde, haben wir einen experimentellen Aufbau vorliegen, in dem Defekte mittels der von außen angelegten elektrischen Spannung kontrolliert werden können. Die dabei auftretende Dynamik zeigt die Bewegung, Entstehung und Vernichtung von Disklinationen.

Um die Wechselwirkung der Defektlinien mit dem Geschwindigkeitsfeld zu untersuchen, reicht die klassische, auf einem uniaxialen Ordnungsparameter basierende Leslie-Ericksen-Theorie (siehe z.B. [20]), in welcher Defektkerne durch Singularitäten repräsentiert werden, nicht mehr aus. Erst ein Ordnungsparameter, welcher auch biaxiale oder isotrope Phasen zulässt, kann das Verhalten qualitativ und quantitativ richtig beschreiben. Aus diesem Grund leiten wir für einen solchen Ordnungs-

parameter eine Hydrodynamik ab und verwenden diese, um den Einfluss von Strömungen auf den Defektkern zu studieren.

Aufbau

Die vorliegende Arbeit kann in zwei Bereiche aufgeteilt werden: Im ersten Teil stellen wir die Grundlagen der Theorie der Flüssigkristalle dar. In **Kapitel 1** werden der nematische Ordnungsparameter eingeführt und die zugehörigen Volumen- und Verzerrungsenergien aufgestellt. Es folgen die Grundlagen zur Theorie der Defekte und zur Nematodynamik. In **Kapitel 2** werden wir die hydrodynamischen Gleichungen für den tensoriellen Ordnungsparameter (Tensordynamik) ableiten und mit der Nematodynamik für den Direktor vergleichen. In **Kapitel 3** gehen wir auf die numerischen Aspekte bei der Lösung dieser Gleichungen ein. Insbesondere richten wir unser Augenmerk auf die korrekte Skalierung der Gleichungen.

Im zweiten Teil schlagen wir einen Bogen von der Beschreibung der Dynamik von Defekten im Direktorbild hin zur Darstellung im Ausrichtungstensor. Dazu betrachten wir zunächst in **Kapitel 4** die Multimänenzelle, in der die Entstehung, Rekombination und Vernichtung von Disklinationen beobachtet werden können. Davon abgesehen untersuchen wir auch die Eigenschaften dieser Zelle hinsichtlich ihres Einsatzes in einem Bildschirm.

Anschließend vollziehen wir in **Kapitel 5** den Übergang zum Ausrichtungstensor: In dünnen Oberflächen-verankerten Filmen werden Abweichungen von der uniaxialen Symmetrie aufgrund starker elastischer Verzerrungen hervorgerufen. In **Kapitel 6** schließlich beschäftigen wir uns mit der Hydrodynamik des tensoriellen Ordnungsparameters. Wir untersuchen die statische Struktur von Disklinationenkernen, die wir dann einer homogenen Strömung aussetzen. Auf diese Weise sind wir in der Lage, ihre hydrodynamische Reibungskraft zu berechnen.

Kapitel 1

Anisotrope Fluide

In diesem Kapitel sollen die für das Verständnis der Theorie und der Simulationen erforderlichen Eigenschaften von Flüssigkristallen knapp beschrieben werden.

Die besonderen Eigenschaften der flüssigkristallinen (oder auch mesogenen) Phasen folgen aus der Existenz einer Orientierungsordnung: Flüssigkristalle bestehen aus organischen Molekülen, die wie bei einer Flüssigkeit frei beweglich sind. So weisen nematische Phasen keine weitreichende Positionsordnung auf. Aufgrund ihrer Molekülkonfiguration zeigen sie jedoch unter bestimmten Bedingungen eine weitreichende Orientierungsordnung, die in einer Anisotropie physikalischer Eigenschaften resultiert. Diese wurde erstmals im Jahre 1888 von FRIEDRICH REINITZER [21] beschrieben.

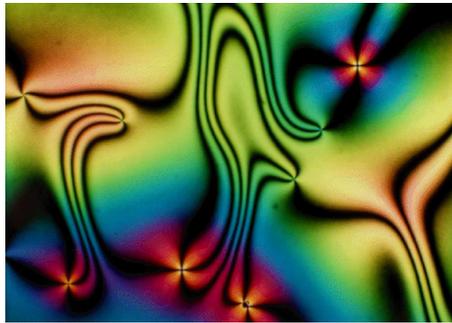


Abbildung 1.1: Aufnahme eines Flüssigkristalls unter dem Polarisationsmikroskop [22]. Die charakteristischen Längen der Orientierungsordnung liegen im Wellenlängenbereich des sichtbaren Lichts (in der obigen Aufnahme wurde der Flüssigkristall mit weißem Licht bestrahlt). Die Helligkeitskontraste kommen durch die relative Orientierung der lokalen optischen Achsen zu den gekreuzten Polarisatoren zustande. An den Stellen, wo vier schwarze Linien zusammenlaufen, befinden sich Punktdefekte.

Man unterscheidet heute eine Vielzahl von verschiedenen flüssigkristallinen Phasen (cholesterische, nematische, smektische, etc.) die für unterschiedliche Molekültypen (stäbchen-, diskus-, bananenförmige, etc.) entweder aufgrund der eingestellten Temperatur (thermotrope Phasen) oder aufgrund eines bestimmten Mischungsverhältnisses (lyotrope Phasen) auftreten. Bei bestimmten Phasen, wie z.B. den smektischen, kann die freie Positionsordnung auch auf zweidimensionale Schichten eingeschränkt sein. Darüber hinaus zeigen auch biologische Objekte Eigenschaften flüssigkristalliner Phasen [23].

Weil Flüssigkristalle zentraler Bestandteil vieler Flachbildschirme sind, ist die Literatur zu diesem Themenkomplex besonders umfangreich. Als Einführung sind die Lehrbücher von DE GENNES [24] und CHANDRASEKHAR [25] sowie der Übersichtsartikel von STEPHEN und STRALEY [26] geeignet. Dort wird insbesondere die Physik der verschiedenen Phasen geschildert. Da wir in dieser Arbeit nur die nematische Phase behandeln, erlauben wir uns, zu allen weitergehenden Fragen auf die Literatur zu verweisen.

1.1 Der nematische Ordnungsparameter

In der nematischen Phase sind die Schwerpunkte der Moleküle frei beweglich; sie zeigen jedoch im Mittel eine Ausrichtung entlang einer ausgezeichneten Richtung ν . Obwohl die einzelnen Moleküle durchaus polar sein können, hat man bisher kein Material mit makroskopischer Polarisation gefunden. Die Polarität mittelt sich also auf mesoskopischer Skala heraus: die beiden Richtungen ν und $-\nu$ sind gleichwertig, und lokal besitzt die nematische Phase eine Inversionssymmetrie. Die Orientierungsordnung der Moleküle führt zu einem anisotropen Dielektrizitätstensor, der die Polarisationsrichtung von Licht beim Durchgang durch den Flüssigkristall ändern kann. Auf diese Weise entstehen die für Flüssigkristalle typischen Texturen (vgl. Abbildung 1.1).

Um für die nematische Phase einen Ordnungsparameter zu konstruieren, benötigen wir mindestens einen Quadrupoltensor: ein skalarer Parameter kann keine Orientierungsordnung wiedergeben, ein Vektor besitzt keine Inversionssymmetrie. Daher resultiert in niedrigster Ordnung ein tensorieller Ordnungsparameter, den wir in dieser Arbeit auch mit \mathbf{Q} -Tensor oder Ausrichtungstensor bezeichnen.

Tabelle 1.1: Übersicht über die in dieser Arbeit auftretenden Ordnungsparameter. Der allgemeine Ordnungsparameter \mathbf{Q} ist ein spurlos-symmetrischer Tensor, der zugehörige Ordnungsparameterraum (OP) ist der \mathbb{R}^5 . Von ihm aus ergibt sich durch Einschränkung auf die Projektive Ebene die uniaxial-nematische Phase. Mittels der Theorie der Homotopiegruppen können aus dem OP die möglichen Defekte abgeleitet werden.

	isotrope Phase	uniaxial-nematische Phase	biaxial-nematische Phase
Symmetrie	$SO(3)$	D_∞	D_2
OP	0^\dagger	Projektive Ebene $\mathbb{P}^2 = SO(3)/D_\infty = S^2/\mathbb{Z}_2$	$\mathbb{R}^5 \setminus \{0\}$
$Q_{\alpha\beta}$	0	$\frac{3}{2}S(n_\alpha n_\beta - \frac{1}{3}\delta_{\alpha\beta})$	$\frac{3}{2}S(n_\alpha n_\beta - \frac{1}{3}\delta_{\alpha\beta})$ $+ \frac{3}{2}P(m_\alpha m_\beta - \frac{1}{3}\delta_{\alpha\beta})$
Eigenwerte von $Q_{\alpha\beta}$	$\lambda_{1,2,3} = 0$	$\lambda_1 = \lambda_2 \neq \lambda_3$	$\lambda_1 \neq \lambda_2 \neq \lambda_3$
Homotopie-Gruppen	–	$\pi_1(P^2) = \mathbb{Z}_2$ $\pi_2(P^2) = \mathbb{Z}$	$\pi_1(\mathbb{R}^5 \setminus \{0\}) = 0$ $\pi_2(\mathbb{R}^5 \setminus \{0\}) = 0$

[†]Eigentlich \mathbb{R}^5 ; da wir den isotropen Anteil stets abziehen, bleibt jedoch nur $\mathbf{Q} = 0$ übrig.

Da wir an der Ordnung relativ zu einem isotropen Referenzzustand interessiert sind, wählen wir \mathbf{Q} darüber hinaus spurlos. In Tabelle 1.1 sind die lokalen Symmetrien, der \mathbf{Q} -Tensor und seine Eigenwerte für die verschiedenen Phasen aufgeführt.

In der isotropen Phase verschwindet der \mathbf{Q} -Tensor. Beim Phasenübergang zur uniaxial nematic Phase wird die isotrope Symmetrie gebrochen. In der uniaxialen Phase bilden die Orientierungen $\{\boldsymbol{\nu}, -\boldsymbol{\nu}\}$ der Moleküle mit der ausgezeichneten Richtung \mathbf{n} einen Winkel ψ . Mittelt man die Orientierungen über ein kleines Testvolumen, so ergibt sich

$$S = \langle P_2 \rangle = \langle \cos^2 \psi - \frac{1}{3} \rangle . \quad (1.1)$$

S ist ein Maß für die Stärke der Ausrichtung. $\frac{3}{2}S = 1$ bedeutet, dass alle Moleküle in die gleiche Richtung zeigen¹, $S = 0$ wiederum steht für die isotrope Phase ($\mathbf{Q} = 0$). Die Vorzugsrichtung \mathbf{n} wird als Direktor bezeichnet, wobei $\{\mathbf{n}, -\mathbf{n}\}$ identifiziert werden. Der Direktor ist auf Eins normiert. Der reduzierte Ordnungsparameterraum (ROP) ist damit die projektive Ebene: Die Spitze des Direktors kann sich auf einer Einheitskugel mit identifizierten Antipoden bewegen. Mittels der Theorie der Homotopiegruppen kann nun auf die in dieser Phase möglichen Defekte (Singularitäten des Ordnungsparameterfeldes) geschlossen werden; in der uniaxialen Phase kann es Punkt- und Liniendefekte geben. Wir gehen Abschnitt 1.3 genauer auf dieses Thema ein.

In der biaxialen Phase gibt es zwei ausgezeichnete Richtungen \mathbf{n} und \mathbf{m} , welche senkrecht aufeinander stehen: $\{\mathbf{n}, -\mathbf{n}\}$, $\{\mathbf{m}, -\mathbf{m}\}$, $\{\mathbf{n} \times \mathbf{m}, -\mathbf{m} \times \mathbf{n}\}$. Die Moleküle sind mit dem Ordnungsgrad S bzw. P (siehe Gleichung (1.1)) um diese Richtungen verteilt, Punkt- und Liniensingularitäten gibt es nun nicht mehr.

DE GENNES [20] hat vorgeschlagen, den anisotropen tensoriellen Ordnungsparameter mit der Anisotropie einer makroskopischen Größe zu korrelieren. Beispielsweise kann man den magnetischen Suszeptibilitäts-tensor $\chi_{\alpha\beta}$ verwenden, der den Zusammenhang zwischen dem magnetischen Moment \mathbf{M} und dem Magnetfeld \mathbf{H} beschreibt: $M_\alpha = \chi_{\alpha\beta} H_\beta$. Für statische Magnetfelder ist $\chi_{\alpha\beta}$ symmetrisch: $\chi_{\alpha\beta} = \chi_{\beta\alpha}$. In der uniaxialen Phase lautet $\chi_{\alpha\beta}$ im Hauptachsensystem

¹Üblicherweise wird in der Literatur $S \in [0..1]$ gewählt; aus Konsistenzgründen haben wir jedoch den Faktor $\frac{3}{2}$ aus S herausgenommen (siehe Tabelle 1.1). Damit muss der Wertebereich entsprechend angepasst werden.

$$\chi_{\alpha\beta} = \begin{pmatrix} \chi_{\perp} & 0 & 0 \\ 0 & \chi_{\perp} & 0 \\ 0 & 0 & \chi_{\parallel} \end{pmatrix}, \quad (1.2)$$

wobei χ_{\perp} und χ_{\parallel} die Suszeptibilitäten senkrecht und parallel zur Vorzugsrichtung sind. Der Ordnungsparameter ist dann

$$Q_{\alpha\beta} \propto \left(\chi_{\alpha\beta} - \frac{1}{3} \delta_{\alpha\beta} \chi_{\gamma\gamma} \right). \quad (1.3)$$

Anstelle der Suszeptibilität kann auch jede andere anisotrope Größe verwendet werden, z.B. der Tensor der Dielektrizität.

Ein Maß für die Biaxialität

Als Maß für die Biaxialität wird folgender Ausdruck verwendet [27, 28]

$$M_{\text{biax}} = 1 - 6 \frac{(\text{sp} \mathbf{Q}^3)^2}{(\text{sp} \mathbf{Q}^2)^3}. \quad (1.4)$$

Zu dieser Form gelangt man, wenn man den Ordnungsparameter \mathbf{Q} in der Form ([29], siehe auch Tabelle 1.1)

$$Q_{\alpha\beta} = \frac{3}{2} S (n_{\alpha} n_{\beta} - \frac{1}{3} \delta_{\alpha\beta}) + \frac{3}{2} P (m_{\alpha} m_{\beta} - \frac{1}{3} \delta_{\alpha\beta}) \quad (1.5)$$

ansetzt. \mathbf{n} , \mathbf{m} und $\mathbf{n} \times \mathbf{m}$ sind die zueinander orthogonalen Eigenvektoren zu den Eigenwerten $\lambda_1 = \frac{2}{3} S - \frac{1}{3} P$, $\lambda_2 = -\frac{1}{3} S + \frac{2}{3} P$ und $\lambda_3 = -\frac{1}{3} S - \frac{1}{3} P$. Im allgemeinsten Fall erhält man fünf unabhängige Komponenten für \mathbf{Q} . Diese lassen sich durch die drei Eulerwinkel (Orientierung des Hauptachsensystems von \mathbf{Q} im Raum) und die zwei skalaren Parameter S und P (Ordnungsgrad für uniaxiale bzw. biaxiale Orientierungsordnung) parametrisieren. In der uniaxialen Phase sind zwei Eulerwinkel sowie ein skalarer Ordnungsparameter ausreichend.

In der isotropen Phase verschwindet der \mathbf{Q} -Tensor identisch ($S = P = 0$), in der nematischen Phase ist er uniaxial, wenn entweder $S = 0, P \neq 0$ oder $S \neq 0, P = 0$ oder aber $P = S \neq 0$. Zusammenfassend lassen sich diese drei Bedingungen zur Uniaxialität schreiben als

$$6(\text{sp} \mathbf{Q}^3)^2 = (\text{sp} \mathbf{Q}^2)^3 \quad (1.6)$$

Das Biaxialitätsmaß ist so konstruiert, dass es im uniaxialen Fall gerade Null wird, und mit steigender Biaxialität gegen Eins geht.

Zur Veranschaulichung setzen wir einen spurlos symmetrischen Tensor \mathbf{A} an und berechnen hierfür das Biaxialitätsmaß M_{biax} :

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} \lambda & 0 & 0 \\ 0 & \mu & 0 \\ 0 & 0 & -\lambda - \mu \end{pmatrix} \longrightarrow M_{\text{biax}}^{\mathbf{A}} = 1 - 6 \frac{(-3\lambda^2\mu - 3\lambda\mu^2)^2}{(2\lambda^2 + 2\mu\lambda + 2\mu^2)^3}.$$

Falls $\mu = \lambda$ wird $M_{\text{biax}}^{\mathbf{A}} = 0$. Mit zunehmender Biaxialität ($\mu \gg \lambda$ oder $\mu \ll \lambda$) strebt $M_{\text{biax}}^{\mathbf{A}}$ gegen 1. In Abbildung 1.2 wird dieser Sachverhalt noch einmal graphisch dargestellt.

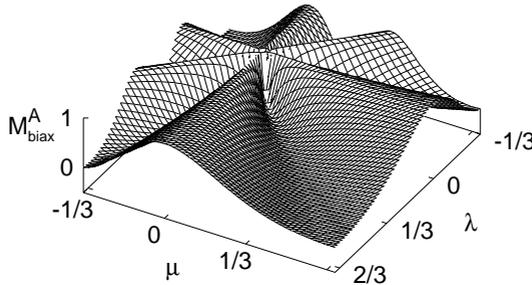


Abbildung 1.2: Veranschaulichung des Biaxialitätsmaßes.

Schließlich sei noch darauf hingewiesen, dass es zwei mögliche Realisierungen eines uniaxialen Tensors gibt, die mittels $\text{sp}\mathbf{Q}^3$ unterschieden werden können:

$$\lambda_1 > \lambda_2 = \lambda_3 \implies \text{sp}\mathbf{Q}^3 > 0, \quad \mathbf{Q} \text{ ist prolat} , \quad (1.7)$$

$$\lambda_1 < \lambda_2 = \lambda_3 \implies \text{sp}\mathbf{Q}^3 < 0, \quad \mathbf{Q} \text{ ist oblat} . \quad (1.8)$$

Landau-Theorie und Volumenenergie

Nachdem wir den Ausrichtungstensor als geeigneten Ordnungsparameter für den nematischen Flüssigkristall kennengelernt haben, können wir eine energetische Beschreibung des Phasenübergangs mit ihm angehen.

Nach LANDAU und LIFSHITZ [30] ist die freie Energie eine analytische Funktion des Ordnungsparameters und der Temperatur². Falls der Ordnungsparameter hinreichend klein ist, können wir die freie Energie nach Potenzen der Invarianten von \mathbf{Q} bis zur vierten Ordnung entwickeln. Unter Berücksichtigung der freien Energie F_0 der isotropen Phase erhalten wir so die Landau-Energie eines nematischen Flüssigkristalls, die in dieser Arbeit auch als Volumenenergie F_{bulk} bezeichnet wird.

$$F_{\text{bulk}} = F_0 + \frac{1}{V} \int d^3r \left[\frac{a}{2} Q_{\alpha\beta} Q_{\beta\alpha} - \frac{b}{3} Q_{\alpha\beta} Q_{\beta\gamma} Q_{\gamma\alpha} + \frac{c}{4} (Q_{\alpha\beta} Q_{\beta\alpha})^2 \right] \quad (1.9)$$

b und c können im Wesentlichen als temperaturunabhängig angesehen werden. Nahe des Phasenübergangs bei der Temperatur $T = T^*$ muß a verschwinden, weshalb wir eine lineare Temperaturabhängigkeit annehmen: $a = a(T - T^*)$.

Eine Minimierung der Entwicklung (1.9) führt stets auf den uniaxialen Ordnungsparameter. Um auch biaxiale Konfigurationen zu beschreiben, müssen Terme bis mindestens zur sechsten Ordnung hinzugenommen werden [24, 25]. Aber auch elastische Anteile der Energie können zu biaxialen Konfigurationen führen, wie wir im nächsten Abschnitt sehen werden.

Setzt man den uniaxialen Ordnungsparameter $Q_{\alpha\beta} = \frac{3}{2}S(n_\alpha n_\beta - \frac{1}{3}\delta_{\alpha\beta})$ in die Landau-Energie ein, so erhält man $F_{\text{bulk}} = F_{\text{bulk}}(S, T)$. Da wir uns in Abschnitt 3.5 sehr detailliert mit den Eigenschaften von F_{bulk} beschäftigen, sei hier nur das qualitative Verhalten geschildert.

²Alle weiteren Abhängigkeiten werden in dieser Arbeit nicht betrachtet und deshalb bereits an dieser Stelle vernachlässigt.

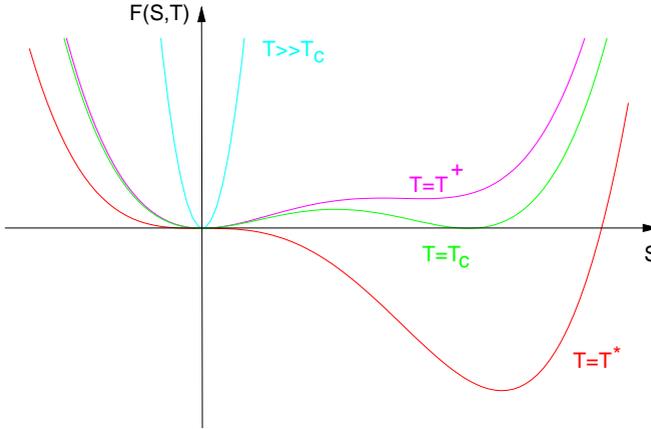


Abbildung 1.3: Landau-Energie für verschiedene Temperaturen.

In Abbildung 1.3 ist die Landau-Energie $F_{\text{bulk}}(S, T)$ für verschiedene Temperaturen über dem skalaren Ordnungsparameter S aufgetragen. Von T^* bis T_c ist die isotrope Phase metastabil, von $T = T_c$ bis $T = T^+$ die flüssigkristalline. Es handelt sich also um einen Phasenübergang erster Ordnung. Experimente zeigen jedoch, dass er nur schwach von erster Ordnung ist, was sich in der Kleinheit des Terms dritter Ordnung äußert. Wie wir im vorangegangenen Abschnitt gesehen haben, entspricht ein prolates uniaxiales \mathbf{Q} dem Minimum von $\text{sp}\mathbf{Q}^3$. Hieraus folgt, dass der Vorfaktor b positiv sein muss (c muss positiv sein, damit stets ein globales Minimum existiert).

Im folgenden Abschnitt werden wir einen weiteren Anteil der freien Energie untersuchen: die Gradientenenergie, die räumliche Verzerrungen des Ordnungsparameterfeldes berücksichtigt. Werden diese größer als $\frac{1}{3}b\text{sp}\mathbf{Q}^3$, treten biaxiale Zustände auf. Der Term dritter Ordnung kann dann in der Volumenenergie vernachlässigt werden. Im Minimum von F_{bulk} gilt $\text{sp}\mathbf{Q}^2 = \text{const.}$, der reduzierte Ordnungsparameterraum ist die Vier-Sphäre S^4 , welche biaxiale Ordnung mit variablen Achsen zulässt. Erreicht die Gradientenenergie die Größenordnung von $\text{sp}\mathbf{Q}^2$, so muss der \mathbf{Q} -Tensor aus dem allgemeinen Ordnungsparameterraum \mathbb{R}^5 gewählt werden. Wie wir in Kapitel 5.2 sehen werden, ist dies in der

vorliegenden Arbeit meistens der Fall.

1.2 Räumliche Variationen des Ordnungsparameters

Im vorangegangenen Kapitel haben wir angenommen, dass sich der Ausrichtungstensor räumlich nicht verändert. Diese Annahme trifft nicht mehr zu, falls das Volumen beschränkt ist oder Defekte im Volumen auftreten. Mögliche Verzerrungen des \mathbf{Q} -Tensorfeldes müssen dann in einer Gradienten-, d.h. elastischen Energie berücksichtigt werden: $F_{\text{elast}} = F_{\text{elast}}(\mathbf{Q}(\mathbf{r}), \nabla \mathbf{Q}(\mathbf{r}))$.

Wir stellen diese Energiebeiträge mit der Invariantentheorie [31, 32, 33] auf. Die Invarianten niedrigster Ordnung sind Polynome in $Q_{\alpha\beta}$ und $Q_{\alpha\beta,\gamma}$. Jedes Polynom in diesen Invarianten ist wieder eine Invariante. Bis zur zweiten Ordnung erhalten wir auf diese Weise die elastische Energie

$$F_{\text{elast}} = \int d^3r \left[\frac{c_1}{2} Q_{\alpha\beta,\gamma} Q_{\alpha\beta,\gamma} + \frac{c_2}{2} Q_{\alpha\beta,\beta} Q_{\alpha\gamma,\gamma} + \frac{c_3}{2} Q_{\alpha\beta,\gamma} Q_{\alpha\gamma,\beta} + \frac{c_6}{2} Q_{\alpha\beta} Q_{\gamma\eta,\alpha} Q_{\gamma\eta,\beta} \right], \quad (1.10)$$

$$F_{\text{chiral}} = \int d^3r \left[-\frac{c_4}{2} \epsilon_{\alpha\beta\gamma} Q_{\alpha\eta} Q_{\gamma\eta,\beta} \right]. \quad (1.11)$$

F_{chiral} tritt hinzu, falls es sich um einen cholesterischen Flüssigkristall handelt³. Setzt man den uniaxialen \mathbf{Q} -Tensor (Tabelle 1.1)

$$Q_{\alpha\beta} = \frac{3}{2} S (n_\alpha n_\beta - \frac{1}{3} \delta_{\alpha\beta}) \quad (1.12)$$

in die elastische Energie (1.10) ein, so erhält man die elastische Energiedichte im Direktorbild. Sie wird auch Frank-Oseen-Energie [34, 35] genannt und beschreibt Verzerrungen im Direktorfeld $\mathbf{n}(\mathbf{r})$. Diese können in vier Basismoden mit zugehörigen elastischen Konstanten zerlegt werden: Spreizung (*splay*, k_{11}), Verdrillung (*twist*, k_{22}), Verbiegung (*bend*, k_{33}) sowie Oberflächenverzerrung (*saddle splay*, k_{24})

³Da wir in dieser Arbeit keine cholesterischen Flüssigkristalle betrachten, erwähnen wir diesen Term nur der Vollständigkeit halber.

$$\begin{aligned}
f_{\text{elast}} + f_{\text{chiral}} &= \frac{1}{2}k_{11} (\text{div } \mathbf{n})^2 + \frac{1}{2}k_{22} \left(\mathbf{n} \cdot \text{rot } \mathbf{n} - \frac{2\pi}{p_0} \right)^2 \\
&\quad + \frac{1}{2}k_{33} (\mathbf{n} \times \text{rot } \mathbf{n})^2 \\
&\quad - k_{24} \text{div}(\mathbf{n} \cdot \text{div } \mathbf{n} + \mathbf{n} \times \text{rot } \mathbf{n}) . \tag{1.13}
\end{aligned}$$

p_0 ist hierbei die Ganghöhe der cholesterischen Helix, die auch als *pitch* bezeichnet wird. Die elastischen Konstanten c_i hängen mit den phänomenologischen Konstanten k_{ii} wie folgt zusammen⁴

$$\begin{aligned}
c_1 \left(\frac{3}{2}S \right)^2 &= \frac{1}{6} (3k_{22} - k_{11} + k_{33}) , & c_2 \left(\frac{3}{2}S \right)^2 &= k_{11} - 2k_{24} , \\
c_3 \left(\frac{3}{2}S \right)^2 &= 2k_{24} - k_{22} , & c_6 \left(\frac{3}{2}S \right)^3 &= \frac{1}{2} (k_{33} - k_{11}) , \\
\frac{1}{2}c_4 \left(\frac{3}{2}S \right)^2 &= \frac{2\pi}{p_0} k_{22} .
\end{aligned}$$

Zur exakten Bestimmung von $S = S(T)$ würde ein vollständiger Satz von Konstanten (bestehend aus $k_{ii}(T)$ und $a(T), b, c$) für einen bestimmten Flüssigkristall benötigt. Da dieser jedoch in der Literatur nicht verfügbar ist, haben wir der Einfachheit halber die Konstanten in dieser Arbeit mit $\frac{3}{2}S = 1$ berechnet.

Die Wechselwirkung des Flüssigkristalls mit einem äußeren elektrischen Feld (von Bedeutung für Displayzellen) beruht auf der Anisotropie der Dielektrizität des Nematens. Diese Wechselwirkung wird durch die elektrische Feldenergie erfasst,

$$F_{\text{elek}} = \int d^3r f_{\text{elek}} = \int d^3r \mathbf{E} \cdot d\mathbf{D} . \tag{1.14}$$

Die Energie F_{elek} drücken wir in Abhängigkeit des elektrischen Potentials ϕ aus. $d f_{\text{elek}} = \mathbf{E} \cdot d\mathbf{D}$ wird zunächst einer Legendre-Transformation unterzogen, um von der extensiven Variablen \mathbf{D} zur intensiven Variable \mathbf{E} überzugehen. Dies ist nötig, da wir in unseren Simulationen keine Ladungsverteilungen betrachten, sondern vielmehr eine konstante elektrische Spannung anlegen werden. Nach der Integration über \mathbf{E} kann man das lineare Materialgesetz $\mathbf{D} = \epsilon_0 \epsilon \mathbf{E}$ einsetzen⁵, wobei ϵ der dielektrische Tensor des nematischen Flüssigkristalls ist, mit einer Komponente ϵ_{\parallel} parallel und ϵ_{\perp} senkrecht zur ausgezeichneten Hauptachse von \mathbf{Q} ,

⁴ $[k_{ii}] = [k_{24}] = [c_i] = \mathbf{N}$, $[c_4] = \frac{\mathbf{N}}{\mathbf{m}}$, $[p_0] = \mathbf{m}$

⁵ $\epsilon_0 = 8,85 \cdot 10^{-12} \frac{\text{As}}{\text{Vm}}$

$$\boldsymbol{\epsilon} = \frac{2\epsilon_{\perp} + \epsilon_{\parallel}}{3} \mathbf{1} + (\epsilon_{\parallel} - \epsilon_{\perp}) \mathbf{Q} . \quad (1.15)$$

Nach Einführung eines elektrischen Potentials ϕ mit $E_{\alpha} = -\phi_{,\alpha}$ erhalten wir für die elektrische Feldenergie

$$F_{\text{elek}} = \int d^3r \left[-\frac{1}{2} \epsilon_0 (\epsilon_{\parallel} - \epsilon_{\perp}) Q_{\alpha\beta} \phi_{,\beta} \phi_{,\alpha} - \frac{1}{2} \epsilon_0 \frac{2\epsilon_{\perp} + \epsilon_{\parallel}}{3} \phi_{,\alpha} \phi_{,\alpha} \right] . \quad (1.16)$$

Setzt man wiederum den uniaxialen \mathbf{Q} -Tensor (1.12) ein, so ergibt sich für die elektrische Feldenergie im Direktorbild,

$$F_{\text{elek}} = \int d^3r \left[-\frac{1}{2} \epsilon_0 (\epsilon_{\perp} \delta_{\alpha\beta} + (\epsilon_{\parallel} - \epsilon_{\perp}) n_{\alpha} n_{\beta}) \phi_{,\alpha} \phi_{,\beta} \right] . \quad (1.17)$$

Während wir in Kapitel 5 und 6 den vollen Ausrichtungstensor verwenden, minimieren wir in Kapitel 4 die elastische Energie im Direktorbild. Hierzu kann man beispielsweise die Euler-Lagrange-Gleichungen ableiten. Da jedoch in der nematischen Phase \mathbf{n} und $-\mathbf{n}$ dieselbe Konfiguration beschreiben, müssen z.B. in numerischen Simulationen vor der Berechnung der Ableitungen über Differenzenquotienten zweier Direktoren diese immer zunächst parallel statt antiparallel ausgerichtet werden. Um diese Schwierigkeit zu umgehen, verwenden wir die folgende Kettenregel für Funktionalableitungen [36]. Der Direktor wird dabei durch die beiden Winkel $w = \varphi$ (Azimutwinkel bzw. *Twist*) bzw. $w = \vartheta$ (Polarwinkel bzw. *Tilt*) parametrisiert:

$$\frac{\delta F}{\delta w} = \frac{\delta F}{\delta Q_{\alpha\beta}} \frac{\delta Q_{\alpha\beta}}{\delta w} = \left[\frac{\partial f}{\partial Q_{\alpha\beta}} - \partial_{\gamma} \frac{\partial f}{\partial (Q_{\alpha\beta,\gamma})} \right] \frac{\delta Q_{\alpha\beta}}{\delta w} = 0 . \quad (1.18)$$

Der Vollständigkeit halber geben wir hier auch noch die Euler-Lagrange-Gleichung für das elektrische Potential an:

$$\frac{\delta F}{\delta \phi} = \underbrace{\frac{\partial f}{\partial \phi}}_{=0} - \partial_{\gamma} \frac{\partial f}{\partial (\phi_{,\gamma})} = 0 . \quad (1.19)$$

1.3 Defekte und Disklinationen

Topologische Defekte folgen aus der Symmetriebrechung beim Phasenübergang⁶. An verschiedenen Stellen im Raum bildet sich spontan eine höhere Ordnung, die Gebiete dehnen sich aus und treffen aufeinander. Da die lokalen Ordnungen in verschiedenen Raumbereichen im Allgemeinen nicht kompatibel sind, bilden sich an den Grenzflächen zwischen den Gebieten Defekte aus.

Die Art der Defekte hängt von Zusammenhangseigenschaften des Ordnungsparameterraums (OP) ab und kann mit Hilfe der Homotopietheorie bestimmt werden. Bei der Klassifizierung von Defektlinien geht man dabei wie folgt vor: um die Defektlinie wird eine Schleife gelegt. Jedem Raumpunkt der Schleife wird ein Direktor im Ordnungsparameterraum zugeordnet, so dass eine Schleife im OP entsteht. Die Anzahl der Direktordrehungen beim Ablaufen der Schleife wird als Windungszahl bezeichnet. Falls die Schleife keinen Defekt umschließt, lässt sie sich auf einen Punkt zusammenziehen. Andernfalls bilden alle Pfade im OP, die sich kontinuierlich ineinander überführen lassen, eine sogenannte Homotopieklasse. Sie identifiziert einen speziellen Defekttyp.

Alle Homotopieklassen zusammen bilden die erste Homotopiegruppe oder auch fundamentale Gruppe, deren Gruppenprodukt die Kombination von Defekten beschreibt. Ersetzt man die Schleifen durch Sphären, so erhält man die zweite Homotopiegruppe, mit welcher Punktdefekte klassifiziert werden können.

In Tabelle 1.1 sind die zu den verschiedenen Ordnungsparametern gehörenden Symmetrien und reduzierte Ordnungsparameterräume (ROP) aufgeführt. Für den uniaxialen Ordnungsparameter erhält man für die erste Homotopiegruppe $\pi_1 = \mathbb{Z}_2$. Sie klassifiziert Liniendefekte, die in Anlehnung an die Dislokationen (Versetzen) in der Festkörperphysik auch als Disklinationen bezeichnet werden. Die zweite Homotopiegruppe $\pi_2 = \mathbb{Z}$ klassifiziert Punktdefekte.

Anschaulich handelt es sich bei Defekten um Singularitäten des Direktorfeldes $\mathbf{n}(\mathbf{r})$. In Abbildung 1.4 sind zwei Liniendefekte der Stärke $s = \pm \frac{1}{2}$, die sich nur im Vorzeichen unterscheiden, abgebildet. Die Defektlinie steht senkrecht auf der Zeichenebene. Die Stärke eines Defektes lässt sich auch im Feldlinienbild ermitteln: Die Spitze eines Direktors

⁶Eine einfache Einführung findet man z.B. in [10, 37].

wird markiert. Der Direktor wird auf einer geschlossenen Schleife um den Defekt geführt. Die Anzahl der Drehungen, die die Spitze beim Umlauf ausgeführt hat, ergibt die Defektstärke. Über das Vorzeichen der Defektstärke entscheidet der Umstand, dass die Drehung mit bzw. gegen den Umlaufsinn erfolgte.

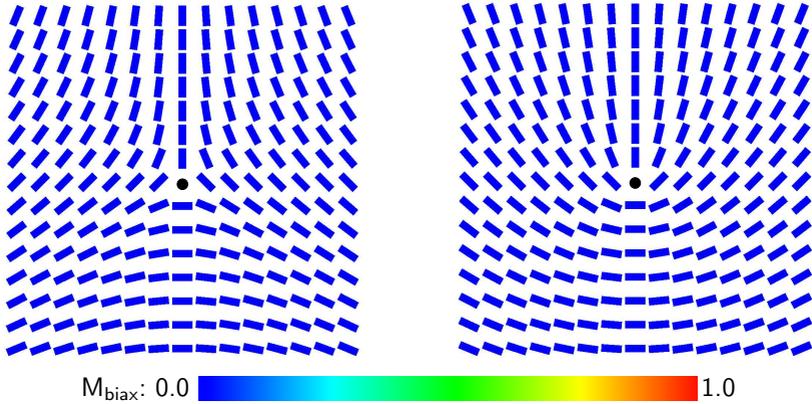


Abbildung 1.4: Direktorfeldlinien zweier halbzahliger Defekte. Links $-\frac{1}{2}$, rechts $+\frac{1}{2}$. Die Singularität ist mit einem Punkt markiert. Die Defektlinie steht in diesem Bild senkrecht auf der Zeichenebene. Zur Beschreibung des Visualisierungsverfahrens siehe Anhang C.

Die in Abbildung 1.4 dargestellten Defektlinien werden als Keil-Disklinationen (*wedge*-Disklinationen) bezeichnet, da sie durch ein dem Voltteraprozess ähnliches Verfahren erzeugt werden können [38]. Es gibt auch noch Schrauben-Disklinationen (*twist*-Disklinationen), wie z.B. in Abbildung 1.5 gezeigt. Hier liegt die Defektlinie nicht senkrecht, sondern parallel zum lokalen Direktorfeld.

Die Singularitäten von halbzahligen Defekten lassen sich durch ein Ausweichen in die biaxiale Phase (*escape*, [39]) beheben. Durch das Ausweichen auf die Vier-Sphäre (oder gar auf $\mathbb{R}^5 \setminus \{0\}$) kann die Singularität durch einen kontinuierlichen Übergang zwischen Zuständen unterschiedlicher Biaxialität ersetzt werden (vgl. Abbildung 1.6).

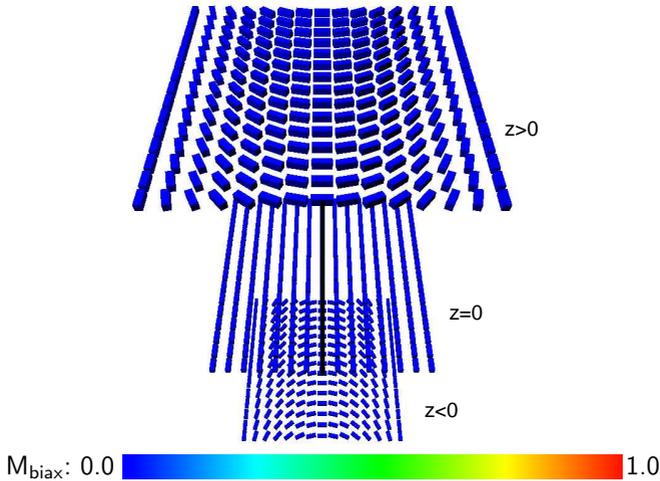


Abbildung 1.5: Aussehen einer Schrauben-Disklination. Dargestellt sind die Ebene, in der die Defektlinie (schwarz markiert) liegt, sowie je eine Ebene oberhalb und unterhalb.

Der *escape* hat große Auswirkungen auf den Kern der Disklination: Im Bild des uniaxialen Ordnungsparameters muss S im Kern gegen Null gehen, um die Singularität zu vermeiden. Der Kern der Defektlinie ist in diesem Bild isotrop. In Wirklichkeit ist der Kern jedoch oblat uniaxial, umgeben von einem Ring maximaler Biaxialität. In Abschnitt 6.2 werden wir das Aussehen des Kerns im Detail untersuchen.

Die topologische Theorie der Defekte liefert uns nur die geometrisch-topologisch möglichen Defektkonfigurationen. Ob ein Defekt physikalisch realisierbar ist, hängt von Energieberechnungen ab. So zeigt es sich, dass die Singularität ganzzahliger Disklinationslinien auch auf andere Art entfernt werden kann: Das Direktorfeld kann in die dritte Dimension (entlang der Defektlinie) ausweichen (*escape*, siehe Abbildung 1.7). Die resultierende Verzerrungsenergie (in diesem Fall eine *bend*-Verzerrung) ist von niedrigerer Energie als der Disklinationkern. Daher resultiert eine defektfreie Konfiguration. Ein ähnliches Phänomen kann auch im Zusammenhang mit einer *splay*-Verzerrung beobachtet werden; wir werden uns in Kapitel 4 genauer damit beschäftigen.

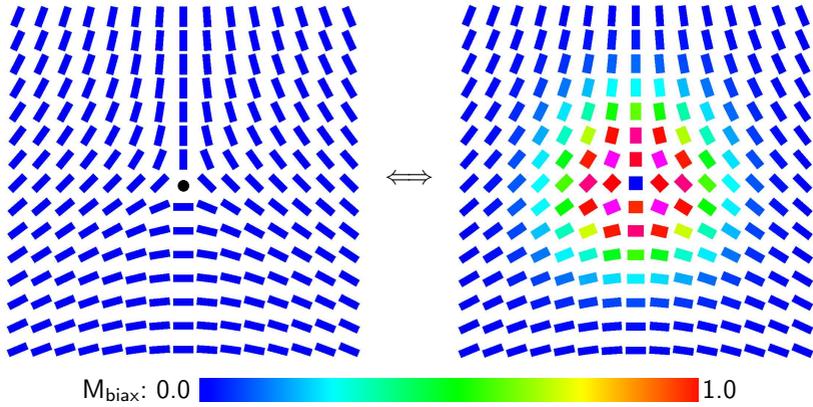


Abbildung 1.6: Biaxiales Ausweichen einer Disklination (*escape*). Auf der linken Seite ist das uniaxiale Direktorfeld dargestellt, auf der rechten ermöglicht der \mathbf{Q} -Tensor ein Ausweichen in die Biaxialität.

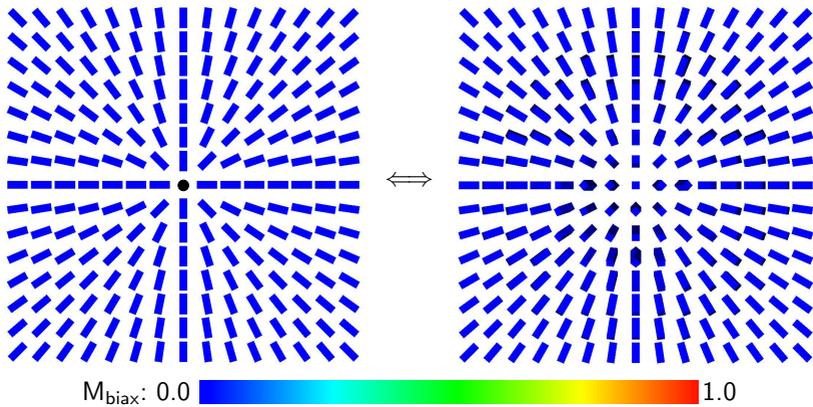


Abbildung 1.7: Direktorfeldlinien eines ganzzahligen Liniendefekts. Links: Schnitt durch die Defektklinie. Rechts: Der Defekt kann durch Ausweichen in die dritte Dimension (Aufsteilen der Direktoren in Richtung senkrecht zur Zeichenebene) entfernt werden.

Eine energetische Untersuchung zeigt auch, dass im Kern einer Disklinationslinie keine Singularität auftritt. Vielmehr wird im Bereich des Defektkerns durch die starken Verzerrungen ein lokaler Phasenübergang zur Biaxialität hin induziert (Abbildung 1.6, rechts). Der Kern selbst ist jedoch nicht isotrop; die uniaxial prolate Konfiguration ist energetisch günstiger.

Während alle Defekte der Stärke $\frac{1}{2}$ topologisch äquivalent sind, fördert eine energetische Untersuchung auch hier Unterschiede zu Tage: die elastische Energie (1.13) bewertet die verschiedenen Verzerrungsmoden mit unterschiedlichen elastischen Konstanten. Da in Defekten unterschiedlichen Vorzeichens *splay*-, *twist*- und *bend*-Verzerrungen nicht überall gleich groß sind, besitzen die Defekte eine unterschiedlich hohe elastischen Energie.

1.4 Hydrodynamik des Direktors

In den letzten Abschnitten haben wir uns ausführlich mit dem nematischen Ordnungsparameter und den damit verbundenen Energien befasst. Dabei haben wir zunächst vernachlässigt, dass der Flüssigkristall auch Fließverhalten zeigt. In diesem Abschnitt wollen wir uns deshalb der Hydrodynamik von Flüssigkristallen zuwenden. Wir werden sehen, dass der Spannungstensor, der in der Navier-Stokes-Gleichung auftritt, elastische und viskose Anteile enthält, die vom Ordnungsparameter abhängen. Die dynamische Gleichung für den Ordnungsparameter ist die Drehimpulsbilanz, in die wiederum der Gradient der Geschwindigkeit eingeht.

Wir betrachten im Folgenden einen uniaxialen Ordnungsparameter und setzen $S = \text{const}$. Die Temperatur halten wir ebenfalls konstant. Der Flüssigkristall wird dann vollständig durch den Direktor \mathbf{n} , die Fließgeschwindigkeit \mathbf{v} , die Dichte ρ und den Druck p beschrieben. Die zugehörige Hydrodynamik wird auch als Nematodynamik bzw. Leslie-Ericksen-Theorie bezeichnet. Die Ableitung der Gleichungen findet man z.B. in [24, 25, 37]; sie erfolgt nach derselben Methode, nach der wir in Kapitel 2 eine Tensordynamik ableiten werden: an die Stelle des Direktors \mathbf{n} tritt dort der Ausrichtungstensor \mathbf{Q} .

Beschränkt man sich auf den Fall eines inkompressiblen Flüssigkristalls, so findet man folgendes Gleichungssystem:

$$0 = \operatorname{div} \mathbf{v} \ , \quad (1.20)$$

$$\rho \frac{d\mathbf{v}}{dt} = \operatorname{div} \boldsymbol{\sigma} \quad \text{mit} \quad \boldsymbol{\sigma} = -p \mathbf{1} + \boldsymbol{\sigma}^{\text{elast}} + \boldsymbol{\sigma}^{\text{irr}} \ , \quad (1.21)$$

$$\mathbf{0} = \mathbf{n} \times (\mathbf{h} - \mathbf{h}') \ . \quad (1.22)$$

Gleichung (1.20) steht für die Inkompressibilitätsbedingung, (1.21) ist die Navier-Stokes Gleichung. $\frac{d\mathbf{v}}{dt} = \frac{\partial}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla$ ist die vollständige zeitliche Ableitung, die auch einen konvektiven Anteil umfasst. Der Spannungstensor $\boldsymbol{\sigma}$ setzt sich zusammen aus dem isotropen hydrostatischen Druck sowie einem elastischen ($\boldsymbol{\sigma}^{\text{elast}}$) und einem irreversiblen viskosen Anteil ($\boldsymbol{\sigma}^{\text{irr}}$). Der elastische Anteil hängt von der freien Energiedichte ab,

$$\sigma_{\alpha\beta}^{\text{elast}} = - \frac{\partial f}{\partial n_{\lambda,\alpha}} \partial n_{\lambda,\beta} \ . \quad (1.23)$$

Der viskose Anteil koppelt den Direktor über die sechs Leslie-Viskositäten α_i an den symmetrischen Anteil $V_{\alpha\beta}^{[s]}$ und den antisymmetrischen Anteil $\boldsymbol{\omega} = \frac{1}{2} \operatorname{rot} \mathbf{v}$ des Geschwindigkeitsgradienten

$$\begin{aligned} \sigma_{\alpha\beta}^{\text{irr}[s]} = & \alpha_1 n_\alpha n_\beta n_\lambda n_\gamma V_{\lambda\gamma}^{[s]} + \alpha_2 n_\beta N_\alpha + \alpha_3 n_\alpha N_\beta \\ & + \alpha_4 V_{\alpha\beta}^{[s]} + \alpha_5 n_\beta n_\lambda V_{\alpha\lambda}^{[s]} + \alpha_6 n_\alpha n_\lambda V_{\beta\lambda}^{[s]} \ , \end{aligned} \quad (1.24)$$

wobei $\mathbf{N} = \frac{\partial}{\partial t} \mathbf{n} - \boldsymbol{\omega} \times \mathbf{n}$. \mathbf{N} gibt die zeitliche Änderung des Direktors im mitbewegten System an. Für die α_i gilt die Parodi-Relation, welche man durch Anwendung des Onsager'schen Theorems [40] erhält,

$$\alpha_2 + \alpha_3 = \alpha_6 - \alpha_5 \ . \quad (1.25)$$

Gleichung (1.22) schließlich ist die Drehimpulsbilanz, die dynamische Gleichung für das Direktorfeld. \mathbf{h} ist das sogenannte Molekularfeld

$$h_\alpha = \frac{\partial f}{\partial n_\alpha} - \partial_\gamma \frac{\partial f}{\partial n_{\alpha,\gamma}} \ . \quad (1.26)$$

\mathbf{h}' kann als viskoser Anteil des Molekularfeldes interpretiert werden,

$$h'_\alpha = \gamma N_\alpha + \tilde{\gamma} V_{\alpha\beta}^{[s]} n_\beta . \quad (1.27)$$

Er beschreibt die Reibung bei der Bewegung der Direktoren relativ zueinander. Die Drehimpulsbilanz enthält keine Trägheitsterme, da diese bei den gegebenen Viskositäten (γ und $\tilde{\gamma}$) und Zeitskalen keine Rolle spielen. Gleichung (1.22) legt das Direktorfeld bis auf einen Faktor $\lambda \mathbf{n}$ fest. λ wird dann für gewöhnlich so gewählt, dass \mathbf{n} auf Eins normiert ist.

Um später die Äquivalenz der Gleichungen für den Direktor und den \mathbf{Q} -Tensor zeigen zu können, geben wir der Vollständigkeit halber noch die lokale Entropieproduktionsrate im Direktorbild an

$$T\theta = \sigma_{\alpha\beta}^{\text{irr}} V_{\alpha\beta}^{[s]} + h'_\alpha N_\alpha . \quad (1.28)$$

Für die Berechnungen in Kapitel 4 verzichten wir auf die Kopplung des Direktors an die Geschwindigkeiten. Die resultierende Dynamik besteht dann in einer vereinfachten Form⁷ der Gleichung (1.22)

$$h_\alpha = \gamma \frac{\partial n_\alpha}{\partial t} . \quad (1.29)$$

Parametrisieren wir den Direktor \mathbf{n} wieder wie in Abschnitt 1.2 mit Tilt- und Twistwinkel ϑ und φ , und verwenden den Umweg über die Kettenregel, so erhalten wir

$$\frac{\delta f}{\delta \vartheta} = \left[\frac{\partial f}{\partial Q_{\alpha\beta}} - \partial_\gamma \frac{\partial f}{\partial Q_{\alpha\beta,\gamma}} \right] \frac{\delta Q_{\alpha\beta}}{\delta \vartheta} = -\gamma \frac{\partial \vartheta}{\partial t} , \quad (1.30)$$

$$\frac{\delta f}{\delta \varphi} = \left[\frac{\partial f}{\partial Q_{\alpha\beta}} - \partial_\gamma \frac{\partial f}{\partial Q_{\alpha\beta,\gamma}} \right] \frac{\delta Q_{\alpha\beta}}{\delta \varphi} = -\gamma \frac{\partial \varphi}{\partial t} \sin^2 \vartheta . \quad (1.31)$$

Im nächsten Kapitel werden wir einen äquivalenten Satz hydrodynamischer Gleichungen für den tensoriellen Ordnungsparameter \mathbf{Q} ableiten.

⁷siehe auch [41].

Kapitel 2

Hydrodynamik des Ausrichtungstensors

Im vorangegangenen Kapitel haben wir gesehen, wie die hydrodynamischen Gleichungen für den uniaxialen Direktor \mathbf{n} aussehen. In diesem Kapitel wollen wir einen äquivalenten Satz von Gleichungen für den tensoriellen Ordnungsparameter \mathbf{Q} ableiten. Anschließend vergleichen wir das Ergebnis mit den Gleichungen der Nematodynamik und der Navier-Stokes-Gleichung einer isotropen Flüssigkeit.

2.1 Die dynamischen Gleichungen

Die nun folgende Ableitung der dynamischen Gleichungen erfolgt in drei Schritten. Zunächst wird die Entropieproduktionsrate in Abhängigkeit von der inneren und der freien Energie aufgestellt. Sodann wird der Begriff der konjugierten Kräfte und Flüsse eingeführt. Schließlich werden die Kräfte als Funktionen der Flüsse entwickelt. Als Ergebnis erhalten wir die Drehimpulsbilanz (und damit die dynamische Gleichung für den Ordnungsparameter) und den Spannungstensor des Flüssigkristalls, der in der Navier-Stokes-Gleichung auftritt; die Materialparameter sind dann die Entwicklungskoeffizienten.

Die hier vorgestellte Ableitung entspricht im Wesentlichen der von OLMSTED [42], wo die Ableitung der Leslie-Ericksen-Theorie [24] vom Direktor \mathbf{n} auf den tensoriellen Ordnungsparameter \mathbf{Q} übertragen wird (vgl. auch [43]).

Die Entropieproduktionsrate

Um die Entropieproduktionsrate abzuleiten, benötigen wir die vollständige zeitliche Ableitung der inneren und freien Energie:

$$\dot{F} = \dot{U} - T\dot{S} \quad \Longrightarrow \quad T\dot{S} = \dot{U} - \dot{F} \quad (2.1)$$

Mit Punkt ($\dot{}$) wird in dieser Arbeit immer eine vollständige zeitliche Ableitung bezeichnet, z.B.

$$\dot{Q}_{\alpha\beta} = \frac{d}{dt}Q_{\alpha\beta} = \frac{\partial}{\partial t}Q_{\alpha\beta} + (\mathbf{v} \cdot \nabla)Q_{\alpha\beta} . \quad (2.2)$$

Die freie Energie ist zusammengesetzt aus der Energie der isotropen Phase, die nur von der Dichte abhängt, der Landau- oder auch Volumenenergie sowie der elastischen oder Oseen-Energie. Hinzu kommt noch die kinetische Energie.

Für die isotrope Energiedichte $f_0(S, \rho)$ (ρ ist die Dichte des Flüssigkristalls) müssen wir noch eine Legendre-Transformation durchführen, um von der Entropie S zur Temperatur T zu wechseln.

In dieser Arbeit wird die Systemtemperatur immer konstant gehalten, weshalb wir funktionale Abhängigkeiten von T nicht mehr mitführen. Aus demselben Grund verschwinden alle Ableitungen nach T . Bei der Lösung der Gleichungen ist darauf zu achten, dass die Werte für die Materialparameter zur gleichen Temperatur verwendet werden, die in der Volumenenergie eingesetzt wird.

$$F = \int f \, d^3r = \int \left[f_0(\rho) + f_L(\mathbf{Q}, \nabla\mathbf{Q}) + \frac{1}{2}\rho|\mathbf{v}|^2 \right] d^3r \quad (2.3)$$

Durch Verwendung der Kontinuitätsgleichung, der Navier-Stokes-Gleichung sowie mittels partieller Integration kann die freie Energie in folgende Form gebracht werden

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}F &= \int \left[(\sigma_{\alpha\beta}^{\text{elast}} - p\delta_{\alpha\beta} - \sigma_{\alpha\beta}^{\text{ges}})V_{\beta\alpha} - H_{\alpha\beta} \frac{d}{dt}Q_{\alpha\beta} \right] d^3r \\ &= \int \left[(-\sigma_{\alpha\beta}^{\text{irr}}V_{\beta\alpha} - H_{\alpha\beta} \frac{d}{dt}Q_{\alpha\beta}) \right] d^3r . \end{aligned} \quad (2.4)$$

Eine ausführliche Ableitung findet man in Anhang A. Der Spannungstensor $\sigma_{\alpha\beta}^{\text{ges}}$ setzt sich zusammen aus dem hydrostatischen Druck p , dem viskosen (irreversiblen) Anteil $\sigma_{\alpha\beta}^{\text{irr}}$ und dem elastischen Anteil¹ $\sigma_{\alpha\beta}^{\text{elast}}$. In der Entropiebilanz tritt nur noch der irreversible Anteil $\sigma_{\alpha\beta}^{\text{irr}}$ auf.

$$\sigma_{\alpha\beta}^{\text{ges}} = \sigma_{\alpha\beta}^{\text{elast}} + \sigma_{\alpha\beta}^{\text{irr}} - p\delta_{\alpha\beta} \quad (2.5)$$

¹Die Ableitung der Formel für den elastischen Anteil findet man z.B. in [24].

$$\sigma_{\alpha\beta}^{\text{elast}} = -\frac{\partial f}{\partial Q_{\lambda\mu,\alpha}} Q_{\lambda\mu,\beta} = \pi_{\alpha\lambda\mu} Q_{\lambda\mu,\beta} \quad (2.6)$$

$H_{\alpha\beta}$ ist das sogenannte Molekularfeld, die Funktionalableitung der freien Energiedichte f nach dem Ordnungsparameterfeld,

$$H_{\alpha\beta} = -\frac{\delta f}{\delta Q_{\alpha\beta}} = \partial_\gamma \frac{\partial f}{\partial Q_{\alpha\beta,\gamma}} - \frac{\partial f}{\partial Q_{\alpha\beta}} \quad (2.7)$$

Außerdem kürzen wir den Geschwindigkeitsgradienten mit

$$V_{\beta\alpha} = \partial_\alpha v_\beta = v_{\beta,\alpha} \quad (2.8)$$

ab. Wir gehen nun von der Entropieproduktionsrate \dot{S} zur lokalen Dichte der Entropieproduktionsrate θ

$$T\dot{S} = \int T\theta d^3r = -\dot{F} = -\frac{d}{dt} \int f d^3r \quad (2.9)$$

über und erhalten

$$T\theta = \sigma_{\alpha\beta}^{\text{irr}} V_{\beta\alpha} + H_{\alpha\beta} \dot{Q}_{\alpha\beta} \quad (2.10)$$

Wir teilen nun $\sigma_{\alpha\beta}^{\text{irr}}$ und $V_{\alpha\beta}$ in ihren spurlos-symmetrischen Anteil, den wir mit $[s]$ bezeichnen, und in ihren antisymmetrischen Anteil, der mit $[a]$ gekennzeichnet wird: $\sigma_{\alpha\beta}^{\text{irr}} = \sigma_{\alpha\beta}^{\text{irr}[s]} + \sigma_{\alpha\beta}^{\text{irr}[a]}$ und $V_{\alpha\beta} = V_{\alpha\beta}^{[s]} + V_{\alpha\beta}^{[a]}$. Die Geschwindigkeitsgradienten sind dabei wie folgt definiert:

$$V_{\alpha\beta}^{[a]} = \frac{1}{2}(\partial_\beta v_\alpha - \partial_\alpha v_\beta) = \frac{1}{2}(v_{\alpha,\beta} - v_{\beta,\alpha}) \quad (2.11)$$

$$\begin{aligned} V_{\alpha\beta}^{[s]} &= \frac{1}{2}(\partial_\beta v_\alpha + \partial_\alpha v_\beta) - \frac{1}{3}\delta_{\alpha\beta} V_{\gamma\gamma} \\ &= \frac{1}{2}(v_{\alpha,\beta} + v_{\beta,\alpha}) - \frac{1}{3}\delta_{\alpha\beta} V_{\gamma\gamma} \end{aligned} \quad (2.12)$$

Auch vom Molekularfeld übernehmen wir nur den spurlos-symmetrischen Anteil. Die Produkte aus symmetrischem und antisymmetrischem Tensor sind jeweils Null.

$$H_{\alpha\beta}^{[s]} = H_{\alpha\beta} - \frac{1}{3}\delta_{\alpha\beta}H_{\gamma\gamma} \quad (2.13)$$

$$T\theta = \sigma_{\alpha\beta}^{\text{irr}[s]}V_{\beta\alpha}^{[s]} + \sigma_{\alpha\beta}^{\text{irr}[a]}V_{\beta\alpha}^{[a]} + H_{\alpha\beta}^{[s]}\dot{Q}_{\alpha\beta} \quad (2.14)$$

Der antisymmetrische Anteil des Spannungstensors stellt eine Drehmomentdichte des Flüssigkristalls dar,

$$\begin{aligned} \sigma_{\alpha\beta}^{\text{irr}[a]} &= H_{\alpha\gamma}^{[s]}Q_{\gamma\beta} - Q_{\alpha\gamma}H_{\gamma\beta}^{[s]} \\ &= \frac{1}{2}\epsilon_{\alpha\beta\gamma}I_{\gamma} \quad , \\ I_{\gamma} &= H_{\alpha\beta}^{[s]}(\epsilon_{\lambda\alpha\mu}Q_{\mu\beta} + \epsilon_{\lambda\beta\mu}Q_{\alpha\mu}) \quad . \end{aligned} \quad (2.15)$$

Wir erhalten also die kompakte Form

$$T\theta = \sigma_{\alpha\beta}^{\text{irr}[s]}V_{\alpha\beta}^{[s]} + H_{\alpha\beta}^{[s]}K_{\alpha\beta} \quad (2.16)$$

für die Entropieerzeugungsrate, mit

$$K_{\alpha\beta} = \dot{Q}_{\alpha\beta} - \left(V_{\alpha\gamma}^{[a]}Q_{\gamma\beta} - Q_{\alpha\gamma}V_{\gamma\beta}^{[a]} \right) \quad . \quad (2.17)$$

$K_{\alpha\beta}$ gibt die zeitliche Änderung des Tensors $Q_{\alpha\beta}$ im mitbewegten System an, wobei diese Änderung nach Komponenten im raumfesten System zerlegt wird (*corotational derivative*, [44, 45]). Die antisymmetrische Drehmatrix $V_{\alpha\beta}^{[a]}$ korrespondiert mit einem Vektor $\boldsymbol{\omega}$, dem Vektor der Winkelgeschwindigkeit, mit der sich das bewegte gegen das raumfeste System dreht. Die Änderung von $Q_{\alpha\beta}$ im bewegten System ist also die lokale zeitliche Änderung $\dot{Q}_{\alpha\beta}$ im bewegten System abzüglich der Änderung, die durch Drehungen des Flüssigkristalls hervorgerufen wird².

² $K_{\alpha\beta}$ ist symmetrisch: $Q_{\alpha\beta}$ ist immer symmetrisch. Mit $V_{\alpha\gamma}^{[a]} = A$ und $Q_{\gamma\beta} = S$ gilt $K = AS - SA = (S^T A^T)^T - (A^T S^T)^T = (-SA + AS)^T = K^T$, die Klammer ist also ebenfalls symmetrisch.

Identifikation der konjugierten Kräfte und Flüsse

Die Entropiebilanz (2.16) ist eine Bilinearform, eine Summe von Produkten aus zwei Faktoren. Es wird jeweils ein Fluss mit einer konjugierten Kraft multipliziert³. Unter einem Fluss wird in der Thermodynamik eine Bewegungsgröße, wie z.B. die Diffusion, die Wärmekonvektion oder auch der Impulsfluss verstanden. In unserem Fall identifizieren wir den viskosen Spannungstensor $\sigma_{\alpha\beta}^{\text{irr}[s]}$ und den Drehimpulsänderung $K_{\alpha\beta}$ als Flüsse.

Thermodynamische Kräfte treiben das System an: Es können Gradienten intensiver Zustandsvariablen oder auch externe Kräfte sein, z.B. Geschwindigkeitsgradienten oder Temperaturgradienten. In unserem Fall handelt es sich um den Geschwindigkeitsgradienten $V_{\alpha\beta}^{[s]}$ und das Molekularfeld $H_{\alpha\beta}^{[s]}$.

- Kräfte sind $V_{\alpha\beta}^{[s]}$ und $H_{\alpha\beta}^{[s]}$.
- Flüsse sind $\sigma_{\alpha\beta}^{\text{irr}[s]}$ und $K_{\alpha\beta}$.

Entwicklung der Kräfte nach den Flüssen

Die lineare Entwicklung der Kräfte nach den Flüssen lautet

$$\sigma_{\alpha\beta}^{\text{irr}[s]} = \Gamma_{\alpha\beta\lambda\rho}^{[1]} V_{\lambda\rho}^{[s]} + M_{\alpha\beta\lambda\rho}^{[1]} H_{\lambda\rho}^{[s]} , \quad (2.18)$$

$$K_{\alpha\beta} = \Gamma_{\alpha\beta\lambda\rho}^{[2]} V_{\lambda\rho}^{[s]} + M_{\alpha\beta\lambda\rho}^{[2]} H_{\lambda\rho}^{[s]} . \quad (2.19)$$

Die Entwicklungskoeffizienten können nun noch stark vereinfacht werden. So resultieren aus dem Onsager'schen Theorem [40] folgende Zusammenhänge:

$$M_{\alpha\beta\lambda\rho}^{[1]} = -M_{\lambda\rho\alpha\beta}^{[2]} , \quad \Gamma_{\alpha\beta\lambda\rho}^{[1]} = \Gamma_{\lambda\rho\alpha\beta}^{[2]} . \quad (2.20)$$

Des Weiteren ergeben sich aus der Spurlosigkeit und Symmetrie der Kräfte und Flüsse die Bedingungen

³Die Wahl der Kräfte ist prinzipiell frei, legt dann aber die konjugierten Flüsse fest. So wird beispielsweise in [24] $\sigma_{\alpha\beta}^{\text{irr}[s]}$ als Kraft interpretiert.

$$M_{\alpha\alpha\lambda\rho}^{[i]} = \Gamma_{\alpha\alpha\lambda\rho}^{[i]} \quad , \quad (2.21)$$

$$M_{\beta\alpha\lambda\rho}^{[i]} = M_{\alpha\beta\lambda\rho}^{[i]} = M_{\alpha\beta\rho\lambda}^{[i]} \quad , \quad (2.22)$$

$$\Gamma_{\beta\alpha\lambda\rho}^{[i]} = \Gamma_{\alpha\beta\lambda\rho}^{[i]} = \Gamma_{\alpha\beta\rho\lambda}^{[i]} \quad . \quad (2.23)$$

Versucht man nun, $\Gamma_{\alpha\beta\lambda\rho}^{[i]}$ und $M_{\alpha\beta\lambda\rho}^{[i]}$ nach $Q_{\alpha\beta}$ zu entwickeln, so stellt man fest, dass die Entwicklung nicht abbricht. Terme beliebiger Ordnung können durch Multiplikation mit Polynomen in $\text{sp} Q_{\alpha\beta}^2$ erzeugt werden. Durch die Invariantentheorie kann die Struktur der Entwicklung bis zu einer bestimmten Ordnung festgelegt und die elastischen Konstanten durch Vergleich mit den Leslie-Viskositäten ermittelt werden. Da in unserem Falle die Temperatur nahe genug am Phasenübergang gewählt wird, können wir von einem kleinen S und damit von einem kleinen \mathbf{Q} ausgehen und brechen die Entwicklung bereits nach dem konstanten Glied ab. Es verbleiben dann nur noch zwei Viskositäten ν_1 und ν_2 , sowie ein dimensionsloser kinetischer Koeffizient ν_3 . Aus Gl. (2.18) erhalten wir somit den Spannungstensor zu

$$\sigma_{\alpha\beta}^{\text{irr}[s]} = \nu_1 V_{\alpha\beta}^{[s]} - \nu_3 H_{\alpha\beta}^{[s]} \quad . \quad (2.24)$$

(2.19) ist die noch fehlende dynamische Gleichung für \mathbf{Q} :

$$K_{\alpha\beta} = \dot{Q}_{\alpha\beta} - \left(V_{\alpha\gamma}^{[a]} Q_{\gamma\beta} - Q_{\alpha\gamma} V_{\gamma\beta}^{[a]} \right) = \nu_3 V_{\alpha\beta}^{[s]} + \frac{1}{\nu_2} H_{\alpha\beta}^{[s]} \quad . \quad (2.25)$$

Zusammen mit der Navier-Stokes-Gleichung

$$\rho \frac{d}{dt} v_\beta = \partial_\alpha \sigma_{\alpha\beta}^{\text{ges}}$$

haben wir nun einen vollständigen Satz dynamischer Gleichungen. Einzig die freie Energie ist in expliziter Form noch nicht bekannt.

2.2 Die verschiedenen Anteile der freien Energie

Als Ausgangspunkt dient die Entwicklung der freien Energie nach Potenzen des Ordnungsparameters \mathbf{Q} , die Landau-Energie F_{bulk} , wie sie in

Abschnitt 3 ausführlich diskutiert wurde⁴.

$$F_{\text{bulk}} = F_0 + \int d^3r \left[\frac{a_0}{2} (T - T^*) Q_{\alpha\beta} Q_{\beta\alpha} - \frac{b}{3} Q_{\alpha\beta} Q_{\beta\gamma} Q_{\gamma\alpha} + \frac{c}{4} Q_{\alpha\beta} Q_{\beta\alpha} Q_{\gamma\eta} Q_{\eta\gamma} \right]$$

Da im Folgenden der absolute Wert der Energie nicht relevant ist und wir lediglich an den Größenverhältnissen der einzelnen Terme interessiert sind, beachten wir F_0 nicht weiter und schreiben für $a_0(T - T^*) = a$, $\frac{1}{3}b = \beta$ und $\frac{1}{4}c = \gamma$ und erhalten damit als freie Energie

$$F_{\text{bulk}} = \int d^3r \left[\frac{a}{2} Q_{\alpha\beta} Q_{\beta\alpha} - \beta Q_{\alpha\beta} Q_{\beta\gamma} Q_{\gamma\alpha} + \gamma Q_{\alpha\beta} Q_{\beta\alpha} Q_{\gamma\eta} Q_{\eta\gamma} \right] \quad (2.27)$$

Für die Landau-Energie wird ein unbegrenztes, homogenes Medium angenommen. Bringt man den Flüssigkristall in eine endliche Geometrie, so sind aufgrund der Randbedingungen Deformationen möglich, denen mit einem zusätzlichen elastischen Anteil an der freien Energie Rechnung getragen werden kann. Deren Form haben wir in Abschnitt 1.2 ausführlich behandelt:

$$F_{\text{elast}} = \int d^3r \left[\frac{c_1}{2} Q_{\alpha\beta,\gamma} Q_{\alpha\beta,\gamma} + \frac{c_2}{2} Q_{\alpha\beta,\beta} Q_{\alpha\gamma,\gamma} + \frac{c_3}{2} Q_{\alpha\beta,\gamma} Q_{\alpha\gamma,\beta} + \frac{c_6}{2} Q_{\alpha\beta} Q_{\gamma\eta,\alpha} Q_{\gamma\eta,\beta} \right]. \quad (2.28)$$

Handelt es sich um einen chiralen Flüssigkristall, so tritt noch ein weiterer Term hinzu:

$$F_{\text{chiral}} = \int d^3r \left[-\frac{c_4}{2} \epsilon_{\alpha\beta\gamma} Q_{\alpha\eta} Q_{\gamma\eta,\beta} \right]. \quad (2.29)$$

Die Wechselwirkung des Flüssigkristalls mit einem äußeren elektrischen Feld wird durch die elektrische Feldenergie (1.16) erfasst, die wir in Abschnitt 1.2 abgeleitet haben:

⁴ $[a_0] = \frac{\text{J}}{\text{m}^3\text{K}}$, $[\gamma] = [\beta] = \frac{\text{J}}{\text{m}^3}$

$$F_{\text{elek}} = \int d^3 r \left[-\frac{1}{2} \epsilon_0 (\epsilon_{\parallel} - \epsilon_{\perp}) Q_{\alpha\beta} \phi_{,\alpha} \phi_{,\beta} - \frac{1}{2} \epsilon_0 \frac{2\epsilon_{\perp} + \epsilon_{\parallel}}{3} \phi_{,\alpha} \phi_{,\alpha} \right] . \quad (2.30)$$

2.3 Vergleich mit den Leslie-Ericksen-Gleichungen

Um die für die Tensordynamik abgeleiteten Gleichungen mit denjenigen der Leslie-Ericksen-Theorie (Abschnitt 1.4) zu vergleichen, setzen wir in den Spannungstensor nun den uniaxialen Ordnungsparameter ein. Wir wählen den Spezialfall der idealen Orientierungsordnung ($\frac{3}{2}S = 1$): $Q_{\alpha\beta}^{\text{uniax}} = n_{\alpha}n_{\beta} - \frac{1}{3}\delta_{\alpha\beta}$. Die Entropiebilanzen lauten

$$\begin{aligned} \mathbf{Q} : \quad T\theta &= \sigma_{\alpha\beta}^{\text{irr}[s]} V_{\alpha\beta}^{[s]} + H_{\alpha\beta}^{[s]} K_{\alpha\beta} , \\ \mathbf{n} : \quad T\theta &= \sigma_{\alpha\beta}^{\text{irr}} V_{\alpha\beta}^{[s]} + h'_{\alpha} N_{\alpha} \end{aligned}$$

und sind damit äquivalent. Nun untersuchen wir den elastischen Anteil des Spannungstensors. Der von DE GENNES angegebene Spannungstensor wird mittels Kettenregel auf \mathbf{Q} umgeschrieben. Man erhält

$$\begin{aligned} \mathbf{n} : \quad \sigma_{\alpha\beta}^{\text{elast}} &= -\frac{\partial f}{\partial n_{\lambda,\alpha}} n_{\lambda,\beta} \\ &= -2 \frac{\partial f}{\partial Q_{\lambda\mu,\alpha}} Q_{\lambda\nu,\beta} n_{\nu} n_{\mu} . \end{aligned}$$

Dies entspricht bis auf den Faktor $2n_{\nu}n_{\mu}$ dem oben abgeleiteten elastischen Spannungstensor (2.6). Nun betrachten wir den symmetrischen Anteil des viskosen Spannungstensors alleine. Hier besteht völlige Symmetrie zwischen den beiden Bildern ($h_{\alpha} = -\delta f / \delta n_{\alpha}$ ist das zum Direktorbild gehörige Molekularfeld):

$$\begin{aligned} \mathbf{Q} : \quad \sigma_{\alpha\beta}^{\text{irr}[a]} &= Q_{\beta\rho} H_{\alpha\rho}^{[s]} - Q_{\alpha\rho} H_{\beta\rho}^{[s]} , \\ \mathbf{n} : \quad \sigma_{\alpha\beta}^{\text{irr}[a]} &= \frac{1}{2}(n_\beta h_\alpha - n_\alpha h_\beta) . \end{aligned}$$

Schließlich wollen wir noch den gesamten viskosen Spannungstensor für das oben angegebene uniaxiale \mathbf{Q} berechnen. Hieraus ergibt sich der Zusammenhang der Viskositäten ν_i mit den Leslie-Viskositäten α_i (siehe Abschnitt 1.4).

$$\begin{aligned} \sigma_{\alpha\beta}^{\text{irr}} &= \sigma_{\alpha\beta}^{\text{irr}[s]} + \sigma_{\alpha\beta}^{\text{irr}[a]} \\ &= \left(\nu_1 V_{\alpha\beta}^{[s]} - \nu_3 H_{\alpha\beta}^{[s]} \right) + \left(Q_{\beta\rho} H_{\alpha\rho}^{[s]} - Q_{\alpha\rho} H_{\beta\rho}^{[s]} \right) \end{aligned} \quad (2.31)$$

Hier ersetzen wir das Molekularfeld $H_{\alpha\beta}^{[s]}$ mittels Gl. (2.25) ($H_{\alpha\beta}^{[s]} = \nu_2 K_{\alpha\beta} - \nu_2 \nu_3 V_{\alpha\beta}^{[s]}$), wobei wir $K_{\alpha\beta}$ für das uniaxiale \mathbf{Q} berechnen,

$$K_{\alpha\beta}^{\text{uniax}} = N_\alpha n_\beta + n_\alpha N_\beta \quad (2.32)$$

mit $N_\alpha = \dot{n}_\alpha - V_{\alpha\beta}^{[a]} n_\beta$. Eingesetzt erhält man für $\sigma_{\alpha\beta}^{\text{irr}}$:

$$\begin{aligned} \sigma_{\alpha\beta}^{\text{irr}} &= \nu_2 [N_\alpha n_\beta - N_\beta n_\alpha] + \nu_2 \nu_3 \left[V_{\beta\lambda}^{[s]} n_\alpha n_\lambda - V_{\alpha\lambda}^{[s]} n_\beta n_\lambda \right] \\ &\quad + [\nu_1 + \nu_2 \nu_3^2] V_{\alpha\beta}^{[s]} - \nu_2 \nu_3 [N_\alpha n_\beta + N_\beta n_\alpha] . \end{aligned} \quad (2.33)$$

Nach Umstellen der Terme erhält man durch Vergleich mit den Leslie-Koeffizienten folgende Zusammenhänge:

$$\begin{aligned} \alpha_1 &= 0 & \alpha_4 &= \nu_1 + \nu_2 \nu_3^2 \\ \alpha_2 &= -\nu_2 - \nu_2 \nu_3 & \alpha_5 &= -\alpha_6 = \nu_2 \nu_3 \\ \alpha_3 &= \nu_2 - \nu_2 \nu_3 \end{aligned}$$

Die obige Zuweisung der viskosen Konstanten erfüllt insbesondere die Parodi-Relation, eine Folge des Onsager'schen Theorems [40]

$$\alpha_2 + \alpha_3 = \alpha_6 - \alpha_5 . \quad (2.34)$$

2.4 Vergleich mit den Gleichungen einer isotropen Flüssigkeit

Den Fall einer isotropen Flüssigkeit erhält man, wenn man $\mathbf{Q} = 0$ setzt. Die freie Energie F und das Molekularfeld $H_{\alpha\beta}$ verschwinden dann ebenfalls und für den Spannungstensor ergibt sich

$$\sigma_{\alpha\beta} = \sigma_{\alpha\beta}^{\text{irr}[s]} - p \delta_{\alpha\beta} = \nu_1 V_{\alpha\beta}^{[s]} - p \delta_{\alpha\beta} . \quad (2.35)$$

In der Navier-Stokes-Gleichung tritt die Divergenz des Spannungstensors auf

$$\begin{aligned} \partial_\alpha \sigma_{\alpha\beta} &= \partial_\alpha \sigma_{\alpha\beta}^{\text{irr}[s]} - \partial_\alpha p \delta_{\alpha\beta} \\ &= \nu_1 \partial_\alpha V_{\alpha\beta}^{[s]} - \partial_\beta p \\ &= \frac{1}{2} \nu_1 (\Delta v_\beta + v_{\alpha,\beta\alpha}) - \partial_\beta p . \end{aligned}$$

Für inkompressible Flüssigkeiten gilt $\partial_\beta v_\beta = 0$, woraus durch Vertauschen der partiellen Ableitungen folgt, dass auch $v_{\alpha,\beta\alpha} = 0$ ist. Die Navier-Stokes-Gleichung lautet also dementsprechend

$$\frac{\partial}{\partial t} v_\beta = -v_\alpha \partial_\alpha v_\beta + \frac{1}{\rho} \partial_\alpha \sigma_{\alpha\beta} = -v_\alpha \partial_\alpha v_\beta + \frac{1}{2} \frac{\nu_1}{\rho} \Delta v_\beta - \frac{1}{\rho} \partial_\beta p . \quad (2.36)$$

Der Viskositätskoeffizient ν_1 in der Tensordynamik hängt also mit der Navier-Stokes-Viskosität η zusammen. Es gilt $\eta = \frac{1}{2} \nu_1$.

2.5 Zusammenfassung der dynamischen Gleichungen

Navier-Stokes Gleichung

$$\frac{d}{dt}v_\beta = \frac{\partial}{\partial t}v_\beta + v_\alpha \partial_\alpha v_\beta = \frac{1}{\rho} \partial_\alpha \sigma_{\alpha\beta} \quad (2.37)$$

Inkompressibilitätsbedingung

$$\partial_\alpha v_\alpha = 0 \quad (2.38)$$

Gleichung für den Tensor-Ordnungsparameter

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}Q_{\alpha\beta} &= \frac{\partial}{\partial t}Q_{\alpha\beta} + Q_{\alpha\beta,\gamma}v_\gamma \\ &= \left[V_{\alpha\gamma}^{[a]}Q_{\gamma\beta} - Q_{\alpha\gamma}V_{\gamma\beta}^{[a]} \right] + \nu_3 V_{\alpha\beta}^{[s]} + \frac{1}{\nu_2} H_{\alpha\beta}^{[s]} \end{aligned} \quad (2.39)$$

Gleichung für den Spannungstensor

$$\sigma_{\alpha\beta} = \sigma_{\alpha\beta}^{\text{elast}} + \sigma_{\alpha\beta}^{\text{irr}[s]} + \sigma_{\alpha\beta}^{\text{irr}[a]} - p\delta_{\alpha\beta} \quad (2.40)$$

$$\begin{aligned} \sigma_{\alpha\beta}^{\text{elast}} &= - \frac{\partial f}{\partial Q_{\lambda\mu,\alpha}} Q_{\lambda\mu,\beta} \\ &= - c_1 Q_{\lambda\mu,\alpha} Q_{\lambda\mu,\beta} - c_2 Q_{\lambda\kappa,\kappa} Q_{\lambda\alpha,\beta} - c_3 Q_{\lambda\alpha,\mu} Q_{\lambda\mu,\beta} \\ &\quad - c_6 Q_{\alpha\kappa} Q_{\lambda\mu,\kappa} Q_{\lambda\mu,\beta} + \frac{1}{2} c_4 \epsilon_{\gamma\alpha\lambda} Q_{\gamma\mu} Q_{\lambda\mu,\beta} \end{aligned} \quad (2.41)$$

$$\sigma_{\alpha\beta}^{\text{irr}[s]} = \nu_1 V_{\alpha\beta}^{[s]} - \nu_3 H_{\alpha\beta}^{[s]} \quad (2.42)$$

$$\sigma_{\alpha\beta}^{\text{irr}[a]} = H_{\beta\rho}^{[s]} Q_{\alpha\rho} - H_{\alpha\rho}^{[s]} Q_{\beta\rho} \quad (2.43)$$

Gleichung für das Molekularfeld

$$\begin{aligned}
H_{\alpha\beta} &= -\frac{\delta f}{\delta Q_{\alpha\beta}} = \partial_\gamma \frac{\partial f}{\partial Q_{\alpha\beta,\gamma}} - \frac{\partial f}{\partial Q_{\alpha\beta}} \\
&= c_1 Q_{\alpha\beta,\gamma\gamma} + (c_2 + c_3) Q_{\alpha\eta,\eta\beta} \\
&\quad + c_6 (Q_{\gamma\eta,\gamma} Q_{\alpha\beta,\eta} + Q_{\gamma\eta} Q_{\alpha\beta,\eta\gamma}) \\
&\quad - \frac{1}{2} c_6 Q_{\eta\gamma,\alpha} Q_{\eta\gamma,\beta} - c_4 \epsilon_{\eta\gamma\alpha} Q_{\eta\beta,\gamma} \\
&\quad - a Q_{\alpha\beta} + 3\beta Q_{\alpha\eta} Q_{\eta\beta} - 4\gamma Q_{\gamma\eta} Q_{\eta\gamma} Q_{\alpha\beta} \\
&\quad + \frac{1}{2} \epsilon_0 (\epsilon_{\parallel} - \epsilon_{\perp}) \phi_{,\alpha} \phi_{,\beta} \tag{2.44}
\end{aligned}$$

$$H_{\alpha\beta}^{[s]} = H_{\alpha\beta} - \frac{1}{3} \delta_{\alpha\beta} H_{\gamma\gamma} \tag{2.45}$$

Freie Energie des Flüssigkristalls

$$F_{\text{ges}} = \int d^3x f_{\text{ges}} = \int d^3x [f_{\text{bulk}} + f_{\text{elast}} + f_{\text{chiral}} + f_{\text{elek}}] \tag{2.46}$$

$$f_{\text{bulk}} = \frac{a}{2} Q_{\alpha\beta} Q_{\beta\alpha} - \beta Q_{\alpha\beta} Q_{\beta\gamma} Q_{\gamma\alpha} + \gamma Q_{\alpha\beta} Q_{\beta\alpha} Q_{\gamma\eta} Q_{\eta\gamma} \tag{2.47}$$

$$\begin{aligned}
f_{\text{elast}} &= \frac{c_1}{2} Q_{\alpha\beta,\gamma} Q_{\alpha\beta,\gamma} + \frac{c_2}{2} Q_{\alpha\beta,\beta} Q_{\alpha\gamma,\gamma} \\
&\quad + \frac{c_3}{2} Q_{\alpha\beta,\gamma} Q_{\alpha\gamma,\beta} + \frac{c_6}{2} Q_{\alpha\beta} Q_{\gamma\eta,\alpha} Q_{\gamma\eta,\beta} \tag{2.48}
\end{aligned}$$

$$f_{\text{chiral}} = -\frac{c_4}{2} \epsilon_{\alpha\beta\eta} Q_{\alpha\eta} Q_{\gamma\eta,\beta} \tag{2.49}$$

$$f_{\text{elek}} = -\frac{1}{2} \epsilon_0 (\epsilon_{\parallel} - \epsilon_{\perp}) \phi_{,\alpha} Q_{\alpha\beta} \phi_{,\beta} - \frac{1}{2} \epsilon_0 \frac{2\epsilon_{\perp} + \epsilon_{\parallel}}{3} \phi_{,\alpha} \phi_{,\alpha} \tag{2.50}$$

Kapitel 3

Skalierung und numerische Aspekte

In dieser Arbeit werden unterschiedliche numerische Verfahren zur Lösung von Differentialgleichungen eingesetzt.

Um eine Konfiguration minimaler freier Energie bei vorgegebenen Randbedingungen zu finden, wird die gesamte freie Energie mittels eines Finite-Elemente-Verfahrens minimiert. Auf diese Weise werden die in Kapitel 5 und 6 diskutierten statischen Konfigurationen berechnet.

Die so gewonnenen Konfigurationen werden dann als Anfangsbedingung für die Behandlung der dynamischen Gleichungen verwendet. Deren Lösung lässt sich in zwei Zeitintegrationen und zwei Relaxationen aufteilen. Wir verwenden hierfür ein explizites Zeitintegrationsverfahren und ein Finite-Differenzen-Verfahren. Die Ergebnisse der Simulationen zur Dynamik werden in Kapitel 6 vorgestellt.

Der erste Schritt bei der Lösung der Gleichungen ist die auf das Problem und die Gleichungen angepasste Reskalierung. Wir kombinieren in den nächsten Abschnitten zwei verschiedene Konzepte: HORNREICH hat für die freie Energie eine Reskalierung gefunden, die auf einer intrinsischen Längenskala aufbaut [46]. Auf der anderen Seite verwenden wir die für die Navier-Stokes-Gleichung übliche Reskalierung und übertragen sie auf die Drehimpulsbilanz. Schließlich diskretisieren wir die Gleichungen.

Zur Lösung des reskalierten Satzes von Gleichungen fehlt noch eine Gleichung zur Bestimmung des Druckes. Auf dieses Problem gehen wir in Abschnitt 3.3 ein. Das Kapitel schließt mit einer Übersicht über die verwendeten Randbedingungen.

Alle in dieser Arbeit eingesetzten numerischen Verfahren sind Standardverfahren und unter ihrem jeweiligen Namen in der Literatur bekannt. Da sie dort wesentlich ausführlicher und genauer behandelt werden, als es der Umfang dieser Arbeit zulässt, verzichten wir hier auf eine Darstellung. Als Ausgangspunkt für ein Literaturstudium sei [47] erwähnt.

3.1 Skalierung der freien Energie

Um die freie Energie zu vereinfachen und sie einer numerischen Behandlung zugänglich zu machen, führen wir reduzierte (d.h. dimensionslose) Variablen ein. Insbesondere gehen wir zu den Verhältnissen zwischen Variablen über, wodurch extreme Größenordnungen, die numerisch schwierig zu behandeln wären, entfernt werden. Außerdem lassen sich dann die physikalischen Eigenschaften der Gleichungen leichter ablesen. Wir lehnen uns an [48, 46] an, wo als Ausgangspunkt für die Skalierung eine charakteristische Länge des Systems verwendet wird.

Box 1 – Reduzierte Variablen

Länge:	$r = b x'$	$[b] = \text{m}$
Geschwindigkeit:	$v_\beta = \tilde{v} v'_\beta$	$[\tilde{v}] = \frac{\text{m}}{\text{s}}$
Zeit:	$t = \frac{b}{\tilde{v}} t'$	$[\frac{b}{\tilde{v}}] = \text{s}$
Hydrostatischer Druck:	$p = \frac{\nu_1 \tilde{v}}{b} p'$	$[\frac{\nu_1 \tilde{v}}{b}] = \frac{\text{N}}{\text{m}^2}$
Q -Tensor:	$\mathbf{Q} = \frac{\beta}{\sqrt{6\gamma}} \boldsymbol{\mu} = s \boldsymbol{\mu}$	$[\frac{\beta}{\sqrt{6\gamma}}] = 1$
Temperatur:	$a = \frac{\beta^2}{12\gamma} t$	$[\frac{\beta^2}{12\gamma}] = \frac{\text{J}}{\text{m}^3}$
Elastische Konstante:	$c_1 = \frac{\beta^2}{12\gamma} \xi_R^2$	$[\frac{\beta^2}{12\gamma} \xi_R^2] = \text{N}$
Elektrisches Potential:	$\phi = \tilde{\phi} \phi'$	$[\frac{1}{2} \epsilon_0 \frac{\gamma}{\beta c_1} \tilde{\phi}^2] = 1$
Freie Energiedichte:	$f = \frac{\beta^4}{36\gamma^3} f' = \tilde{f} f'$	$[\tilde{f}] = \frac{\text{J}}{\text{m}^3}$
Freie Energie:	$F = \frac{\beta^4}{36\gamma^3} b^3 F' = \tilde{F} F'$	$[\tilde{F}] = \text{J}$
Elast. Spannungstensor:	$\sigma_{\alpha\beta}^{\text{elast}} = \tilde{f} \sigma_{\alpha\beta}^{\text{elast}'}$	
Molekularfeld:	$H_{\alpha\beta} = \frac{\tilde{f}}{s} H'_{\alpha\beta}$	$[\frac{\tilde{f}}{s}] = \frac{\text{J}}{\text{m}^3}$
Reynoldszahl:	$Re = \frac{\rho}{\nu_1} \tilde{v} b$	$[Re] = 1$
Stelzerzahl:	$St_1 = \frac{\nu_1 \tilde{v}}{b f}$	$[St_1] = 1$
Starkzahl:	$St_2 = \frac{\nu_2 \tilde{v}}{b f} s^2$	$[St_2] = 1$

In der freien Energie ist eine intrinsische Länge vorhanden, die sogenannte Kohärenzlänge ξ_R , die über die Elastizitätskonstante definiert ist ($\xi_R^2 = \frac{12\gamma}{\beta^2} c_1$). Sie ist typischerweise von der Größenordnung 10 nm und gibt an, wie weit eine an einer Oberfläche vorgegebene Ordnung in die angrenzende isotrope Phase hineinreicht. Betrachtet man charakteristische Eigenschaften der freien Energie, so ist eine Reskalierung auf ξ_R sinnvoll.

In dieser Arbeit wollen wir Flüssigkristalle in eingeschränkten Geometrien untersuchen, die eine charakteristische Länge b besitzen¹. Wir reskalieren deshalb unsere Gleichungen auf b , geben b aber in Einheiten von ξ_R an. Wie wir in Kapitel 5 sehen werden, lässt sich auf diese Weise das Wechselspiel zwischen Volumenenergie und elastischer Energie besonders gut untersuchen.

Box 1 gibt eine Übersicht über alle Variablen und deren Reskalierung. In der dritten Spalte ist die Dimension der jeweiligen Skalierungsfaktoren angegeben. Man erkennt, dass auf diese Weise tatsächlich ein Übergang zu dimensionslosen Variablen vollzogen wird². Die reskalierte freie Energie ist in Box 2 angegeben.

In Gl. (3.1) können zwei verschiedene Anteile identifiziert werden: Der erste Summand ist die Volumenenergie, die direkt von \mathbf{spQ} abhängt. Die restlichen Terme bedeuten eine reine Gradientenenergie; diese setzt sich aus einem elastischen, einem chiralen und einem elektrischen Anteil zusammen. Der Gradientenanteil unterscheidet sich von dem Volumenanteil um den Faktor ξ_R^2/b^2 .

Dieser Faktor macht die Abhängigkeit der freien Energie von der Längenskala deutlich: Zunächst wählen wir $b \gg \xi_R$, was z.B. bei Displayzellen der Fall ist, wo b im μm -Bereich liegt ($\xi_R \approx 10\text{nm}$).

Im Verhältnis zur Volumenenergie ist der Beitrag der elastischen Energie nun sehr klein. Er kann als Störung der Volumenenergie aufgefasst werden. Wenn wir nun eine numerische Minimierung der freien Energie versuchen, so stellen wir fest, dass das Problem schlecht konditioniert ist. Beinahe jede elastische Verzerrung ist numerisch möglich, solange sich das System im Minimum der Volumenenergie befindet. Eigentlich bestimmt jedoch gerade die elastische Energie das System.

¹Zum Beispiel die Schichtdicke einer Displayzelle.

² $J = \text{Nm} = \text{AVs}$, $\text{N} = \frac{\text{kg m}}{\text{s}^2}$, $\frac{\text{N}}{\text{m}^2} = \frac{\text{J}}{\text{m}^3}$, $1 \frac{\text{N}}{\text{m}^2} = 1 \text{Pa} = 10^{-5} \text{bar}$, $[\nu_1]_{SI} = \frac{\text{kg}}{\text{m s}}$
 $\frac{\text{Ns}}{\text{m}^2} = \text{Pa s} = \text{Poiseuille}$, $[\nu_1]_{cgs} = \frac{\text{g}}{\text{cm s}} = \frac{\text{dyn s}}{\text{cm}^2} = \text{Poise}$, $1 \text{Poiseuille} = 10 \text{Poise}$

Box 2 – Reduzierte freie Energie des Flüssigkristalls

$$F_{\text{ges}} = \int d^3x f_{\text{ges}} = \int d^3x [f_{\text{bulk}} + f_{\text{elast}} + f_{\text{chiral}} + f_{\text{elek}}] \quad (3.1)$$

$$f_{\text{bulk}} = \frac{1}{4} t \mu_{\alpha\beta} \mu_{\beta\alpha} - \sqrt{6} \mu_{\alpha\beta} \mu_{\beta\gamma} \mu_{\gamma\alpha} + \mu_{\alpha\beta} \mu_{\beta\alpha} \mu_{\gamma\eta} \mu_{\eta\gamma} \quad (3.2)$$

$$f_{\text{elast}} = \frac{1}{4} \frac{\xi_R^2}{b^2} \mu_{\alpha\beta,\gamma} \mu_{\alpha\beta,\gamma} + \frac{1}{4} \frac{c_2}{c_1} \frac{\xi_R^2}{b^2} \mu_{\alpha\beta,\beta} \mu_{\alpha\gamma,\gamma} \\ + \frac{1}{4} \frac{c_3}{c_1} \frac{\xi_R^2}{b^2} \mu_{\alpha\beta,\gamma} \mu_{\alpha\gamma,\beta} + \frac{1}{4\sqrt{6}} \frac{c_6}{c_1} \frac{\xi_R^2}{b^2} \frac{\beta}{\gamma} \mu_{\alpha\beta} \mu_{\gamma\eta,\alpha} \mu_{\gamma\eta,\beta} \quad (3.3)$$

$$f_{\text{chiral}} = -\frac{1}{4} \frac{c_4}{c_1} \frac{\xi_R^2}{b} \epsilon_{\alpha\beta\eta} \mu_{\alpha\eta} \mu_{\gamma\eta,\beta} \quad (3.4)$$

$$f_{\text{elek}} = -\frac{3}{\sqrt{6}} (\epsilon_{\parallel} - \epsilon_{\perp}) \frac{\xi_R^2}{b^2} \mu_{\alpha\beta} \phi_{,\alpha} \phi_{,\beta} - (2\epsilon_{\perp} + \epsilon_{\parallel}) \frac{\xi_R^2}{b^2} \frac{\gamma}{\beta} \phi_{,\alpha} \phi_{,\alpha} \quad (3.5)$$

Das Minimum der Volumenenergie ist ein uniaxialer Ordnungsparameter³. Durch die Randbedingungen werden Verzerrungen im Direktorfeld aufgeprägt. Die zu diesen Verzerrungen gehörige Energie wird jedoch in unserem Fall mit ξ_R^2/b^2 skaliert, und damit numerisch vernachlässigbar klein.

Es folgt also eine Grenze für b , oberhalb der unsere Numerik keine sinnvollen Lösungen mehr finden kann. Die gleiche Problematik wurde auch in [49] beschrieben. Aus diesem Grund beschränken wir uns auf mesoskopische Größenordnungen unserer Simulationsbox. Da wir insbesondere an biaxialen Zuständen interessiert sind, stellt die Beschränkung auf $b < 70 \xi_R$ jedoch kein Problem dar.

An dieser Stelle wollen wir noch eine Bemerkung zur unteren Grenze von b machen. Da die Kohärenzlänge ξ_R die Längenskala ist, auf der sich Ordnungs-Unordnungs-Übergänge abspielen, wählen wir $b \geq \xi_R$. Unterhalb dieser Grenze verlassen wir den Gültigkeitsbereich der tensoriellen Beschreibung. Für Abmessungen kleiner als ξ_R ist es angebracht,

³Vgl. hierzu Abschnitt 1.1.

die Wechselwirkungen der Moleküle untereinander direkt zu modellieren, wie z.B. durch das Gay-Berne-Potential [50], einer Erweiterung des Lennard-Jones-Potentials auf anisotrope Wechselwirkungen.

3.2 Einführung der Reynoldszahl

Die Skalierung der freien Energie wurde im vorigen Abschnitt geschildert. Um die dynamischen Gleichungen auf dimensionslose Variablen umzuschreiben, setzen wir bei der Navier-Stokes-Gleichung an, die typischerweise so skaliert wird, dass das gesamte System durch eine einzige Größe, die Reynoldszahl Re , beschrieben werden kann. Die hydrodynamische Navier-Stokes-Gleichung lautet (mit $\nu_1 = 2\eta$, gemäß Abschnitt 2.4)

$$\rho \frac{d}{dt} v_\beta = -\partial_\beta p + \frac{1}{2} \nu_1 \Delta v_\beta .$$

Diese Gleichung wird nun wie folgt reskaliert: $v_\beta = \tilde{v} v'_\beta$, $r = b x'$, $t = \frac{b}{\tilde{v}} t'$ und $p = \frac{\nu_1 \tilde{v}}{b} p'$. Bei den Gradienten und der zeitlichen Ableitung wurde ' der Übersichtlichkeit halber weggelassen. \tilde{v} ist eine systemtypische Geschwindigkeit, b ist die systemtypische Länge, die wir bereits bei der Skalierung der freien Energie verwendet haben.

Mit diesen neuen dimensionslosen Variablen geht die Navier-Stokes-Gleichung über in

$$Re \frac{d}{dt} v'_\beta = -\partial_\beta p' + \frac{1}{2} \Delta v'_\beta ,$$

wobei $Re = \frac{\rho}{\nu_1} \tilde{v} b$ die Reynoldszahl ist.

Dasselbe Ergebnis erhält man, wenn man die Gleichung mit dem Faktor $\frac{b^2}{\nu_1 \tilde{v}}$ multipliziert. Dieses Vorgehen führt uns auf die Skalierung der Navier-Stokes-Gleichung in der Tensordynamik. Dort enthält die Gleichung auch elastische und anisotrop-viskose Anteile des Spannungstensors (vgl. (2.37) bis (2.43)),

$$\rho \frac{d}{dt} v_\beta = -\partial_\beta p + \partial_\alpha \sigma_{\alpha\beta}^{\text{elast}} + \partial_\alpha \sigma_{\alpha\beta}^{\text{irr}[s]} + \partial_\alpha \sigma_{\alpha\beta}^{\text{irr}[\alpha]} .$$

Hinsichtlich des symmetrischen irreversiblen Anteils des Spannungstensors $\sigma_{\alpha\beta}^{\text{irr}[s]} = \nu_1 V_{\alpha\beta}^{[s]} - \nu_3 H_{\alpha\beta}^{[s]}$ führt dessen erster Summand $V_{\alpha\beta}^{[s]}$, wie in

Abschnitt 2.4 bereits gezeigt, auf den Term $\frac{1}{2}\nu_1\Delta v_\beta$. Für den zweiten Summanden $-\nu_3H_{\alpha\beta}^{[s]}$ sowie für $\sigma_{\alpha\beta}^{\text{elast}}$ und $\sigma_{\alpha\beta}^{\text{irr}[a]}$ muss die Reskalierung noch durchgeführt werden. Da diese verbleibenden Anteile spezifisch für die Anisotropie des Flüssigkristalls sind, fassen wir sie in einem Spannungstensor $\sigma_{\alpha\beta}^{\text{FLK}}$ zusammen.

Box 3 – Reduzierte Gleichungen

Reduzierte Navier-Stokes Gleichung

$$Re \frac{d}{dt} v'_\beta = -\partial_\beta p' + \frac{1}{2} \Delta v'_\beta + \frac{1}{St_1} \partial_\alpha \sigma_{\alpha\beta}^{\text{FLK}} \quad (3.6)$$

Reduzierte Inkompressibilitätsbedingung

$$\partial_\alpha v'_\alpha = 0 \quad (3.7)$$

Reduzierte Drehimpulsbilanz des Flüssigkristalls

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \mu_{\alpha\beta} &= \frac{\partial}{\partial t} \mu_{\alpha\beta} + \mu_{\alpha\beta,\gamma} v'_\gamma \\ &= \left[V_{\alpha\gamma}^{[a]'} \mu_{\gamma\beta} - \mu_{\alpha\gamma} V_{\gamma\beta}^{[a]'} \right] + \frac{\nu_3}{s} V_{\alpha\beta}^{[s]'} + \frac{1}{St_2} H'_{\alpha\beta} \end{aligned} \quad (3.8)$$

Euler-Lagrange Gleichung für das reduzierte elektrische Potential

$$\begin{aligned} EL_\phi &:= \partial_\gamma \frac{\partial f}{\partial \phi_{,\gamma}} - \underbrace{\frac{\partial f}{\partial \phi}}_{=0} = 0 \\ &= -\sqrt{6}(\epsilon_{\parallel} - \epsilon_{\perp}) \left(\frac{\xi_R^2}{b^2} \right) [\mu_{\alpha\gamma,\gamma} \phi_{,\alpha} + \mu_{\alpha\gamma} \phi_{,\alpha\gamma}] \\ &\quad - 2(2\epsilon_{\perp} - \epsilon_{\parallel}) \left(\frac{\xi_R^2}{b^2} \right) \frac{\gamma}{\beta} \phi_{,\gamma\gamma} \end{aligned} \quad (3.9)$$

Box 4 – Reduzierte Hilfsgrößen

Reduzierter Spannungstensor

$$\sigma_{\alpha\beta}^{\text{FLK}} = -\frac{\nu^3}{s} H_{\alpha\beta}^{[s]'} + \left[H_{\beta\rho}^{[s]'} \mu_{\alpha\rho} - H_{\alpha\rho}^{[s]'} \mu_{\beta\rho} \right] + \sigma_{\alpha\beta}^{\text{elast}'} \quad (3.10)$$

$$\begin{aligned} \sigma_{\alpha\beta}^{\text{elast}'} = & \left[-\frac{1}{2} \mu_{\mu\nu,\alpha} \mu_{\mu\nu,\beta} - \frac{1}{2} \frac{c_2}{c_1} \mu_{\mu\gamma,\gamma} \mu_{\mu\alpha,\beta} \right. \\ & - \frac{1}{2} \frac{c_3}{c_1} \mu_{\rho\alpha,\lambda} \mu_{\rho\lambda,\beta} - \frac{1}{2\sqrt{6}} \frac{c_6}{c_1} \frac{\beta}{\gamma} \mu_{\alpha\gamma} \mu_{\mu\nu,\gamma} \mu_{\mu\nu,\beta} \\ & \left. + \frac{1}{4} \frac{c_4}{c_1} b \epsilon_{\mu\alpha\rho} \mu_{\mu\lambda} \mu_{\rho\lambda,\beta} \right] \left(\frac{\xi_R^2}{b^2} \right) \end{aligned} \quad (3.11)$$

Reduziertes Molekularfeld

$$\begin{aligned} H'_{\alpha\beta} = & -\frac{\delta f}{\delta \mu_{\alpha\beta}} = \partial_\gamma \frac{\partial f}{\partial \mu_{\alpha\beta,\gamma}} - \frac{\partial f}{\partial \mu_{\alpha\beta}} \\ = & -\frac{1}{2} t \mu_{\alpha\beta} + 3\sqrt{6} \mu_{\alpha\gamma} \mu_{\gamma\beta} - 4\mu_{\gamma\eta} \mu_{\eta\gamma} \mu_{\alpha\beta} \\ & + \frac{1}{2} \frac{\xi_R^2}{b^2} \mu_{\alpha\beta,\gamma\gamma} + \frac{1}{2} \left(\frac{c_2 + c_3}{c_1} \right) \frac{\xi_R^2}{b^2} \mu_{\alpha\gamma,\gamma\beta} \\ & + \frac{1}{2\sqrt{6}} \frac{c_6}{c_1} \frac{\xi_R^2}{b^2} \frac{\beta}{\gamma} (\mu_{\gamma\eta,\gamma} \mu_{\alpha\beta,\eta} + \mu_{\gamma\eta} \mu_{\alpha\beta,\eta\gamma}) \\ & - \frac{1}{4\sqrt{6}} \frac{c_6}{c_1} \frac{\xi_R^2}{b^2} \frac{\beta}{\gamma} \mu_{\gamma\eta,\alpha} \mu_{\gamma\eta,\beta} - \frac{1}{2} \frac{c_4}{c_1} \frac{\xi_R^2}{b} \epsilon_{\eta\gamma\alpha} \mu_{\eta\beta,\gamma} \\ & + \frac{3}{\sqrt{6}} (\epsilon_{\parallel} - \epsilon_{\perp}) \frac{\xi_R^2}{b^2} \phi_{,\alpha} \phi_{,\beta} \end{aligned} \quad (3.12)$$

$$H_{\alpha\beta}^{[s]'} = H'_{\alpha\beta} - \frac{1}{3} \delta_{\alpha\beta} H'_{\gamma\gamma} \quad (3.13)$$

Zu jedem Zeitpunkt benötigen wir noch den Verlauf des elektrischen Potentials. Dieses folgt im Wesentlichen instantan dem sich einstellenden Ordnungsparameterfeld und weist daher keine explizite Zeitabhängigkeit auf. Es kann somit aus der statischen Euler-Lagrange-Gleichung bestimmt werden, die mit der Maxwell-Gleichung $\operatorname{div} \mathbf{D} = 0$ identisch ist.

Zur Impulsbilanz der Navier-Stokes-Gleichung kommt noch eine Drehimpulsbilanz, nämlich die dynamische Gleichung für \mathbf{Q} . Wir verwenden wiederum dieselben Reskalierungen und erhalten als Ergebnis Gleichung (3.8).

Ähnlich wie die Reynoldszahl das Verhältnis der Trägheitskräfte zu den viskosen Kräften angibt, haben wir in Gl. (3.6) und (3.8) zwei neue Verhältnisse definiert. Sie geben jeweils das Verhältnis zwischen der viskosen Energie und der freien Energie an, wobei die viskose Energie im einen Fall durch die Fließgeschwindigkeit, im anderen durch die Rotation des \mathbf{Q} -Tensors zustande kommt. Wir bezeichnen diese Zahlen zur besseren Unterscheidung nach den Herren J. STELZER [51] und H. STARK [37].

3.3 Lösung des Druckproblems

Bei der Lösung der Navier-Stokes-Gleichung (3.6) ergibt sich das Problem, dass keine Bestimmungsgleichung für den darin auftauchenden Druck vorhanden ist. Für die diskretisierte Form der Gleichungen lässt sich dieses Problem jedoch wie folgt beheben [52]: Der Druck wird als Lagrange-Parameter angesehen, über den die Inkompressibilitätsbedingung (3.7) an die Impulsbilanz gekoppelt wird. Wie wir sehen werden, ist der Druck allerdings nur bis auf eine additive Konstante bestimmbar. Das Navier-Stokes-Gleichungssystem eines inkompressiblen Flüssigkristalls in reduzierten Variablen lautet

$$Re \frac{d}{dt} v_\beta = -\partial_\beta p + \frac{1}{2} \Delta v_\beta + \frac{1}{St_1} \partial_\alpha \sigma_{\alpha\beta}^{\text{FLK}} , \quad (3.14)$$

$$\partial_\alpha v_\alpha = 0 . \quad (3.15)$$

Zunächst diskretisieren wir die partielle Zeitableitung (den konvektiven Anteil bringen wir auf die andere Seite),

$$\frac{\partial}{\partial t} v_\beta \implies \frac{1}{\delta t} (v_\beta^{\text{neu}} - v_\beta^{\text{alt}}) . \quad (3.16)$$

Wir lösen die diskrete Navier-Stokes-Gleichung auf nach v_β^{neu} ,

$$v_\beta^{\text{neu}} = F_\beta - \frac{\delta t}{Re} \partial_\beta p . \quad (3.17)$$

Hierbei ist

$$F_\beta = v_\beta^{\text{alt}} + \delta t \left[\frac{1}{2 Re} \Delta v_\beta^{\text{alt}} + \frac{1}{Re St_1} \partial_\alpha \sigma_{\alpha\beta}^{\text{FLK}} - v_\alpha^{\text{alt}} \partial_\alpha v_\beta^{\text{alt}} \right] . \quad (3.18)$$

Nun fordern wir für die neuen Geschwindigkeiten v_β^{neu} die Divergenzfreiheit der inkompressiblen Flüssigkeit, und erhalten aus Gl. (3.17) eine Poisson-Gleichung als Bestimmungsgleichung für den Druck,

$$\partial_\beta v_\beta^{\text{neu}} = 0 \implies \partial_\beta F_\beta = \frac{\delta t}{Re} \partial_\beta \partial_\beta p . \quad (3.19)$$

Zur Lösung dieser Poisson-Gleichung wird noch eine Randbedingung benötigt. Diese können wir in Form von Neumann-Randbedingungen erhalten, wenn wir Gl. (3.17) an den Oberflächen auswerten. Liegen diese beispielsweise auf der oberen und unteren Fläche eines Quaders, so ist $\mathbf{n} = (0, 0, \pm 1)^T$. Die alten Geschwindigkeiten v_β^{alt} und die neuen Geschwindigkeiten v_β^{neu} sind am Rand bekannt. Außerdem stellt die Oberfläche für den Flüssigkristall ein unüberwindbares Hindernis dar, weshalb wir die Geschwindigkeitskomponenten in Normalenrichtung an der Oberfläche ($v_z^{\text{neu,alt}} = 0$) gleich Null setzen. Diese Vorgaben liefern aus Gl. (3.17) die Gleichung am Rand

$$\partial_z p = \frac{Re}{\delta t} F_z . \quad (3.20)$$

Die partielle Ableitung in Normalenrichtung wird wieder diskretisiert (n und $n-1$ seien zwei benachbarte Punkte in z -Richtung). An der oberen Quaderoberfläche ist $p^{\text{Rand}} = p^{\text{max}} \hat{=} p^n$, an der unteren ist $p^{\text{Rand}} = p^0 \hat{=} p^{n-1}$ und

$$\partial_z p = \frac{1}{\delta z} (p^n - p^{n-1}) \implies p^n - p^{n-1} = \delta z \frac{Re}{\delta t} F_z . \quad (3.21)$$

Mit diesen Randbedingungen kann nun der neue Druck im gesamten Volumen berechnet werden. Er steht dann zur Berechnung der neuen Geschwindigkeiten mittels Gl. (3.17) zur Verfügung.

3.4 Das diskretisierte Gleichungssystem

Nachdem nun die reskalierten Gleichungen in diskreter Form abgeleitet wurden, sollen sie der Übersichtlichkeit halber noch einmal zusammengefasst werden. Gleichzeitig wird der Programmablauf transparent. Nachdem eine Startkonfiguration vorgegeben (und ggf. statisch minimiert) worden ist, kann die Lösung der dynamischen Gleichungen erfolgen. Die Drehimpulsbilanz und die Navier-Stokes-Gleichung werden durch ein explizites Zeitintegrationsverfahrens gelöst, die Poisson-Gleichung für den Druck und die Euler-Lagrange-Gleichung für die elektrische Spannung mittels des Newton-Gauss-Seidel-Verfahrens relaxiert.

Drehimpulsbilanz

Zunächst werden die neuen \mathbf{Q} -Tensoren aus der Drehimpulsbilanz berechnet. Da der \mathbf{Q} -Tensor spurlos-symmetrisch ist, werden in der folgenden Gleichung nur fünf unabhängige Komponenten berechnet⁴:

$$\begin{aligned} \mu_{\alpha\beta}^{\text{neu}} = & \mu_{\alpha\beta}^{\text{alt}} - \delta t \mu_{\alpha\beta,\gamma} v_{\gamma}^{\text{alt}} + \delta t \left[V_{\alpha\gamma}^{[a]\text{alt}} \mu_{\gamma\beta} - \mu_{\alpha\gamma} V_{\gamma\beta}^{[a]\text{alt}} \right] \\ & + \frac{\delta t \nu_3}{s} V_{\alpha\beta}^{[s]\text{alt}} + \frac{\delta t}{St_2} H_{\alpha\beta}^{\text{alt}} \end{aligned} \quad (3.22)$$

Lösung der Poisson-Gleichung für den Druck

Aus den alten Geschwindigkeiten und dem alten Spannungstensor (der vor der Drehimpulsbilanz berechnet wurde) kann nun die Poisson-Gleichung für den Druck aufgestellt werden. Durch die Lösung der Gleichung wird der Druck so eingestellt, dass die Divergenz der Geschwindigkeiten verschwindet⁵.

⁴ $\mu_{xx}, \mu_{xy}, \mu_{xz}, \mu_{yy}, \mu_{yz}$. Es gilt $\text{sp}(\mu_{\alpha\beta,\gamma} v_{\gamma}^{\text{alt}}) = \mu_{\alpha\alpha,\gamma} v_{\gamma}^{\text{alt}} = 0$

⁵ $\text{sp}V_{\alpha\beta} = V_{\alpha\alpha} = \text{div } \mathbf{v} = 0$, dies ist numerisch nicht exakt erfüllt!

$$\begin{aligned} \partial_\beta \partial_\beta p &= \frac{Re}{\delta t} \partial_\beta F_\beta = \frac{Re}{\delta t} \partial_\beta v_\beta^{\text{alt}} + \frac{1}{2} \partial_\beta \Delta v_\beta^{\text{alt}} \\ &\quad + \frac{1}{St_1} \partial_\beta \partial_\alpha \sigma_{\alpha\beta}^{\text{FLK}} - Re \partial_\beta v_\alpha^{\text{alt}} \partial_\alpha v_\beta^{\text{alt}} \end{aligned} \quad (3.23)$$

Berechnung der neuen Geschwindigkeiten

Aus dem nunmehr divergenzfreien Geschwindigkeitsfeld können die neuen Geschwindigkeiten berechnet werden.

$$\begin{aligned} v_\beta^{\text{neu}} &= F_\beta - \frac{\delta t}{Re} \partial_\beta p = v_\beta^{\text{alt}} - \frac{\delta t}{Re} \partial_\beta p \\ &\quad + \delta t \left[\frac{1}{2 Re} \Delta v_\beta^{\text{alt}} + \frac{1}{Re St_1} \partial_\alpha \sigma_{\alpha\beta}^{\text{FLK}} - v_\alpha^{\text{alt}} \partial_\alpha v_\beta^{\text{alt}} \right] \end{aligned} \quad (3.24)$$

Lösung der Euler-Lagrange-Gleichung für die elektrische Spannung

$$\begin{aligned} 0 &= -\sqrt{6}(\epsilon_\parallel - \epsilon_\perp) \left(\frac{\xi_R^2}{b^2} \right) [\partial_\gamma \mu_{i\gamma} \partial_i U + \mu_{i\gamma} \partial_\gamma \partial_i U] \\ &\quad - 2(2\epsilon_\perp - \epsilon_\parallel) \left(\frac{\xi_R^2}{b^2} \right) \frac{\gamma}{\beta} \partial_\gamma \partial_\gamma U \end{aligned} \quad (3.25)$$

Iteration

Jetzt sind alle Variablen zum neuen Zeitpunkt bekannt. Alle abhängigen Variablen wie z.B. der Spannungstensor und das Molekularfeld werden neu berechnet. Auch die Randbedingungen müssen angepasst werden. Dann startet die Berechnung des nächsten Zeitschrittes wieder mit der Drehimpulsbilanz.

3.5 Randbedingungen

Ordnungsparameter (Q-Tensor)

Um am Rand eine Aussage darüber treffen zu können, wie der **Q**-Tensor aussehen soll, wechseln wir an diesen Stellen in das uniaxiale Bild des Direktors **n** und schreiben **Q** als:

$$Q_{\alpha\beta}^{\text{uniax}} = \frac{3}{2} S \left(n_\alpha n_\beta - \frac{1}{3} \delta_{\alpha\beta} \right) \quad (3.26)$$

wobei wir den skalaren (uniaxialen) Ordnungsparameter S noch bestimmen müssen. Dazu wird $\boldsymbol{\mu}^{\text{uniax}} = \frac{1}{s} \mathbf{Q}^{\text{uniax}}$ in f_{bulk} (3.2) eingesetzt. Für die freie Energiedichte des Volumens in reduzierten Variablen erhalten wir dann

$$f_{\text{bulk}}^{\text{uniax}} = \frac{3}{8} t S'^2 - \frac{3}{4} \sqrt{6} S'^3 + \frac{9}{4} S'^4, \quad (3.27)$$

wobei $S' = \frac{S}{s}$ der reskalierte Ordnungsparameter ist. Die Funktion $f_{\text{bulk}}^{\text{uniax}}(S')$ ist in Abbildung 3.1 für verschiedene Temperaturen dargestellt.

Für die Simulation benötigen wir nun für eine vorgegebene Temperatur t das durch die Landau-Energie vorgegebene S' , welches die freie Energie im uniaxialen Fall minimiert. Wir leiten also $f_{\text{bulk}}^{\text{uniax}}$ nach S' ab und setzen die Ableitung gleich Null. Dadurch erhalten wir drei Lösungen, die den verschiedenen Phasen des Flüssigkristalls zugeordnet werden können. $S'_1 = 0$ gehört zur isotropen Phase, $S'_{2,3} = +\frac{1}{8}\sqrt{6} \pm \frac{1}{24}\sqrt{54-48t}$ gehören zur nematischen ($S_2 > 0$) und zur diskotischen ($S_3 < 0$) Phase [20].

Die reduzierte freie Energie ist in Abbildung 3.1 für verschiedene Temperaturen dargestellt. Um Simulationen in der nematischen Phase durchzuführen, verwenden wir S'_2 , um einen uniaxialen Ordnungsparameter auf dem Rand vorzugeben.

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\mu}^{\text{uniax}}(t, \mathbf{n}) &= \frac{3}{2} S'_2(t) \left(\mathbf{n} \otimes \mathbf{n} - \frac{1}{3} \mathbf{1} \right) \\ &= \frac{3}{2} \left(\frac{1}{8} \sqrt{6} + \frac{1}{24} \sqrt{54-48t} \right) \left(\mathbf{n} \otimes \mathbf{n} - \frac{1}{3} \mathbf{1} \right) \end{aligned} \quad (3.28)$$

Schließlich seien hier noch die Eigenwerte im uniaxialen Fall angegeben. Diese erhält man sehr einfach, wenn man den Direktor entlang einer der Koordinatenachsen ausrichtet: $\mathbf{n} = (0, 0, 1)^T$. Die Eigenwerte des \mathbf{Q} -Tensors lassen sich dann direkt ablesen ($S'_2(t = -1) = 0, 727$):

$$\lambda_{1/2} = \frac{3}{2}S'(t)\left(-\frac{1}{3}\right) = -\frac{1}{2}S'(t), \quad (3.29)$$

$$\lambda_3 = \frac{3}{2}S'(t)\left(\frac{2}{3}\right) = S'(t) . \quad (3.30)$$

Der \mathbf{Q} -Tensor besitzt also eine ausgezeichnete Richtung, welche λ_3 zuzuordnen ist. Die Eigenwerte $\lambda_{1/2}$ sind entartet, die Verteilung der Moleküle ist also rotationssymmetrisch.

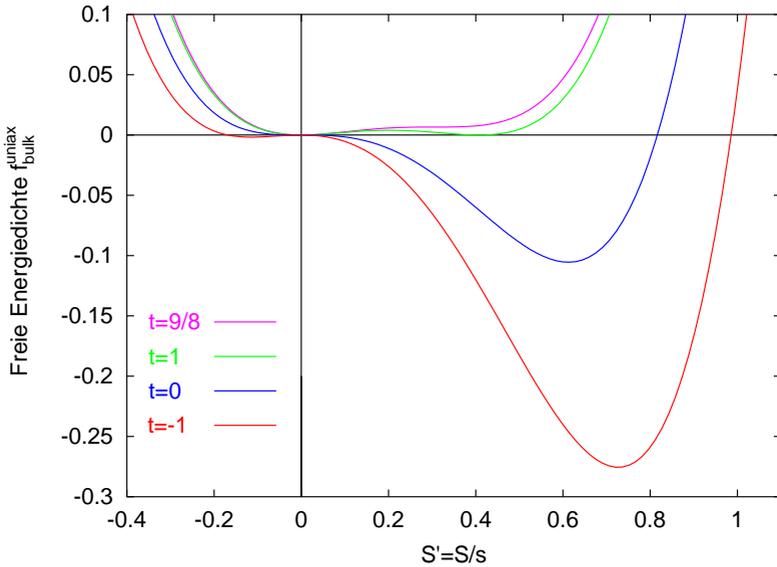


Abbildung 3.1: Landau-Energie für verschiedene Temperaturen. Aufgetragen ist die Volumenenergie f_{bulk} über dem uniaxialen Ordnungsparameter $S' = \frac{S}{s}$ für verschiedene Temperaturen. $t = 9/8$: die nematische Phase ist gerade noch metastabil, $t = 1$: der Phasenübergang findet statt, $t = 0$: die isotrope Phase ist gerade noch metastabil, $t = -1$: die nematische Phase ist die alleinig stabile, $S'_2(-1) = 0,727$.

Geschwindigkeit

Für \mathbf{v} werden in dieser Arbeit folgende Randbedingungen gesetzt:

- Haftbedingung: tangente und normale Komponente der Geschwindigkeit sind an der Oberfläche vorgegeben.
- Ein- und Ausströmbedingung: Normalableitungen der Komponenten werden gleich Null gesetzt, d.h. die Geschwindigkeit senkrecht zum Rand soll sich nicht ändern.

Andere Variablen

Die Randbedingungen für den Druck folgen aus dessen Gradienten längs der Probedimension Gl. (3.21). Der Spannungstensor σ , das Molekularfeld \mathbf{H} und die oben eingeführte Abkürzung \mathbf{F} werden aus \mathbf{v} und \mathbf{Q} berechnet. Für die Bestimmung ihrer Ableitungen werden diese Größen auch auf dem Rand benötigt. Wir extrapolieren daher in erster Ordnung die Volumendaten auf den Rand.

Disklinationsdynamik im Direktorbild

Bevor wir uns in den beiden folgenden Kapiteln der Statik und Dynamik von anisotropen Fluiden in der tensoriellen Beschreibung widmen, wollen wir in diesem Kapitel ein Verständnis für die Dynamik von Defektlinien entwickeln. Dazu untersuchen wir in vereinfachter Theorie die dynamischen Prozesse in der Multidomänenzelle (MD-Zelle), einer speziellen Realisierung einer *twisted nematic*-Zelle (TN-Zelle, [53]), wobei wir unser besonderes Augenmerk auf die Erzeugung und Vernichtung von Disklinationen richten.

In der MD-Zelle wechseln sich rechts- und linksdrehende Helizes des Direktors ab. Dies wird erreicht durch eine spezielle Wahl der Verankerungswinkel an den Oberflächen, welche in einem Netz von Twist-Disklinationen resultieren. In diesem Kapitel wollen wir anhand einer Direktordynamik, welche nur auf einer Rotationsviskosität beruht, untersuchen, wie sich die Defektlinien bewegen, wenn man an die MD-Zelle eine elektrische Spannung anlegt.

Werden die Verankerungswinkel hinreichend klein gewählt, so kann im spannungsfreien Zustand eine defektfreie Konfiguration auftreten, in welcher der Drehsinn aller Helizes übereinstimmt. Da die Oberflächen jedoch auch hier strukturiert sind, müssen bei angelegter elektrischer Spannung Defektlinien existieren. Diese werden also im Rahmen des Schaltprozesses erzeugt bzw. vernichtet.

Die in diesem Kapitel vorgestellten Ergebnisse wurden in [54] veröffentlicht.

4.1 Die Multidomänenzelle

Ursprünglich stammt die Idee der Multidomänenzelle aus der Informationstechnologie: Flachbildschirme sind sowohl sparsam im Energieverbrauch, als auch in ihrem Platzbedarf. Jedoch müssen ihre optischen Qualitäten durch Techniken wie *in-plane switching* (IPS) [55] und op-

tische Kompensation verbessert werden. Sind diese Techniken für teure Bildschirme noch finanzierbar, so fehlt es an einfachen Lösungen für billige Displays: Der Kontrast TN-basierter [53] Bildschirme hängt stark vom Blickwinkel ab. Mit der Multidomänenzelle [56, 57] wurde eine einfache Möglichkeit realisiert, um dieses Problem zu lösen.

Wie oben bereits erwähnt, bedingen die speziellen Randbedingungen das Auftreten von Defekten. Außer ihrem Einsatz als Display kann die MD-Zelle deshalb auch als Laborsystem zur Untersuchung von topologischen Prozessen für Defekte verwendet werden. Diese sind von fundamentalem Interesse auf dem Gebiet der Flüssigkristalle [58, 59, 60, 61, 62].

Bei der klassischen TN-Zelle werden die Flüssigkristallmoleküle an den Glasplatten parallel zur Oberfläche ausgerichtet. Sie schließen einen Winkel von 90 Grad ein, weshalb die Moleküle im Volumen zwischen den Platten eine Helix ausbilden. Indem man die Oberflächenmoleküle aus der Ebene der Glasplatten herausdreht, kann man die Drehrichtung der Helix festlegen.

Legt man eine hinreichend starke elektrische Spannung an eine TN-Zelle an, so werden die Moleküle im Volumen vollständig entlang des Feldes ausgerichtet. Einen Bildschirm mit Graustufen erhält man, wenn man die Spannung erniedrigt und so eine nur teilweise Ausrichtung der Moleküle einstellt. Verschiedene Spannungen liefern verschiedene Graustufen; ein Teil der Helixstruktur ist dabei noch vorhanden, und elastische und elektrische Energie halten sich die Waage. Da alle Helizes in dieselbe Richtung drehen, kommt es zu einer Brechung der Inversionsasymmetrie. Damit ist der Kontrast stark vom Blickwinkel abhängig.

In der Multidomänenzelle wird diese Symmetriebrechung vermieden, indem der Drehwinkel der Helizes alternierend eingestellt wird. Dazu müssen die Glasplatten in Domänen strukturiert werden. Ein Beispiel für eine solche Strukturierung ist in Abbildung 4.1 zu sehen. Die optischen Effekte der verschiedenen Domänen¹ kompensieren sich auf der Längenskala eines Bildschirmpixels, und die Abhängigkeit des Kontrastes vom Blickwinkel wird stark reduziert. In der Literatur finden sich verschiedene Realisierungsmöglichkeiten für die Oberflächenstruktur [56, 57, 63, 64]. Bei allen ist eine klare Verbesserung erkennbar.

Da die Direktorfelder von rechts- und linksdrehenden Helizes nicht über-

¹In [56] besteht ein Displaypixel z.B. aus vier Domänen.

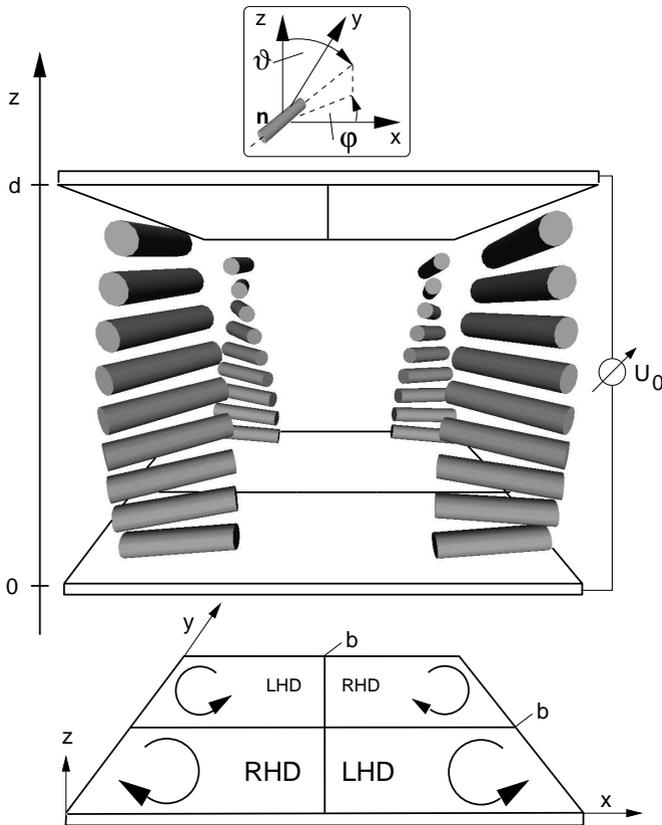


Abbildung 4.1: Schematische Ansicht der Multidomänenzelle: Die Platten bei $z = 0$ und $z = d$ begrenzen das Simulationsvolumen. Sie sind in Streifen der Breite b mit unterschiedlicher Verankerungsrichtung in x - und y - Richtung unterteilt. Der nematische Direktor wird durch die beiden Winkel φ (Polar- oder Twistwinkel) und ϑ (Azimutal- bzw. Tiltwinkel) beschrieben. Die Ausrichtung des Direktors an den Platten ist entlang der Streifenrichtung. Der Pretilt ϑ_p wird festgehalten. Die Streifen unterscheiden sich dann im Twistwinkel φ_p um 180° (vgl. auch Tabelle 4.1). Es resultiert ein Schachbrettmuster aus rechts- (RHD) und linksdrehenden Helizes (LHD).

all kontinuierlich aneinandergesetzt werden können, zeigen alle Realisierungen der MD-Zelle an den Domänengrenzen ein charakteristisches Netz von Liniendefekten mit Twist-Charakter [65]. Die Ausdehnung des Defektkerns liegt bei etwa 10 nm (vgl. [65] oder auch Abschnitt 6.2). Er ist damit im Vergleich zur Ausdehnung einer Domäne von 100 μm vernachlässigbar für den Kontrast des Bildschirmpixels.

Tabelle 4.1: Oberflächenstruktur des Direktors (φ_p, ϑ_p) und elektrisches Potential (ϕ) der Zelle in Abbildung 4.1. ϑ_p und U_0 sind freie Simulationsparameter, wobei $U_0 = 0\text{ V}$ oder $U_0 = 4\text{ V}$ gewählt wird.

Koordinaten	Twistwinkel an der Oberfläche	Tiltwinkel an der Oberfläche	angelegte Spannung
$z = 0, 0 < y < b$	$\varphi_p = 0^\circ$	ϑ_p	$\phi = 0$
$z = 0, b < y < 2b$	$\varphi_p = 180^\circ$	ϑ_p	$\phi = 0$
$z = d, 0 < x < b$	$\varphi_p = 90^\circ$	ϑ_p	$\phi = U_0$
$z = d, b < x < 2b$	$\varphi_p = 270^\circ$	ϑ_p	$\phi = U_0$

Das Konfigurations-Phasendiagramm

Wie bereits erwähnt, hängt das Auftreten von Defektlinien davon ab, wie der Tiltwinkel an den Oberflächen gewählt wird. Die freie Energie einer Disklination setzt sich aus der Energie des Kerns und aus einem elastischen Anteil zusammen. Durch die Umkehr der Drehrichtungen aller Helizes eines Typs (RHD oder LHD) können die Defektlinien eliminiert werden. Um der weniger begünstigten Drehrichtung Rechnung zu tragen, muss eine zusätzliche Splay-Deformation in der Nähe der Oberflächen eingeführt werden. Falls deren elastische Energie kleiner ist als die Kernenergie der Disklination, wird die defektfreie Konfiguration bevorzugt. Die Vermeidung solcher Splay-Deformationen zugunsten von anderen Verzerrungen oder gar Defekten wird in der Literatur mit *splay canceling* [57, 66, 67] bezeichnet. Es tritt auf für Tiltwinkel kleiner als ϑ_p^D , wie im Phasendiagramm in Abbildung 4.2 [31] zu sehen. Der Tiltwinkel wird dabei gegen die Plattennormale gemessen: $\vartheta_p = 90^\circ$ bedeutet, dass die Moleküle parallel zur Platte liegen.

Will man die MD-Zellen als Display einsetzen, so muss die Oberflächenverankerung so gewählt werden, dass die Helizes alternieren, d.h. die

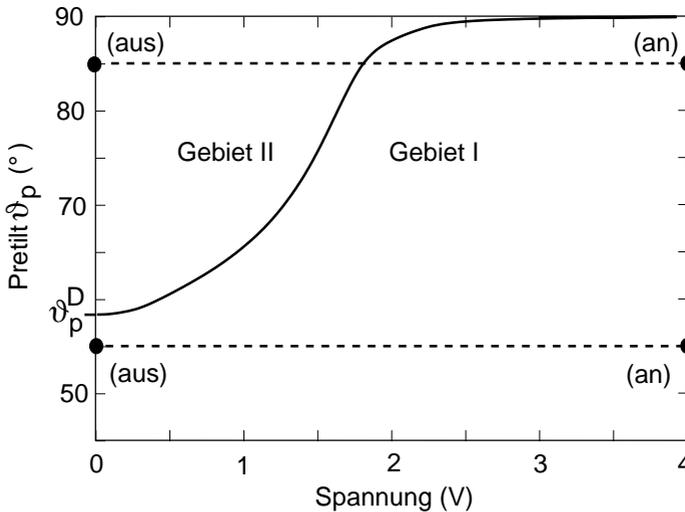


Abbildung 4.2: Konfigurations-Phasendiagramm der MD-Zelle aus [31]. Zwei Gebiete können unterschieden werden. Gebiet I: die Zelle enthält Disklinationen, wie aufgrund der Randbedingungen erwartet. Gebiet II: Für kleine Spannungen und Verankerungswinkel werden die Disklinationen durch inverses *splay canceling* entfernt. Alle Helizes drehen in die gleiche Richtung. Die gestrichelten Linien geben die Schaltprozesse wieder, die in diesem Kapitel untersucht werden.

Disklinationslinien immer vorhanden sind. Dies entspricht dem unteren Schaltprozess in Abbildung 4.2. In Abschnitt 4.2 werden wir die Defektbewegungen eines solchen Schaltvorganges untersuchen.

Vom theoretischen Standpunkt ist der obere Schaltprozess in Abbildung 4.2 von größerem Interesse: Während bei $U_0 = 0$ V eine homogene Drehrichtung aller Helizes vorliegt (Gebiet II), enthalten Konfigurationen in Gebiet I Defektlinien. Beim Schalten nach $U_0 = 4$ V muss also ein Konfigurationsübergang stattfinden, bei dem Dislinationen entstehen. Wir diskutieren diesen Schaltvorgang in Abschnitt 4.3.

Numerische Aspekte

Die Simulationen dieses Kapitels basieren auf den in Kapitel 1 abgeleiteten Euler-Lagrange-Gleichungen (1.18) und (1.19), die mittels eines Finite-Differenzen-Verfahrens diskretisiert und dann mit dem Newton-Gauß-Seidel-Verfahren [47] gelöst werden. Dabei nehmen wir an, dass der skalare Ordnungsparameter S in der nematischen Phase konstant ist ($\frac{3}{2}S = 1$). Die so erhaltene Konfiguration minimaler elastischer Energie wird als Anfangsbedingung für die Dynamik verwendet.

Die Integration der Bewegungsgleichungen (1.30) und (1.31) erfolgt mittels eines expliziten Zeitintegrationsverfahrens [47], wobei wir annehmen, dass das elektrische Potential der Direktorbewegung instantan folgt und wir die statische Euler-Lagrange-Gleichung (1.19) zu jedem Zeitpunkt lösen können.

Disklinationen

Disklinationen sind Singularitäten des Direktorfeldes. Diese treten in unseren Simulationen nicht explizit auf, da wir die Gleichungen auf einem Gitter diskretisieren. Dennoch wird durch die freie Energie der Umgebung der Singularität eine Defektlinienenergie berechnet, die von der Größenordnung der Kernenergie ist [65]. Um die Kernenergie in der Simulation zu berücksichtigen, müsste zu jedem Zeitschritt die Länge der Disklination bestimmt werden. Da die Korrektur das qualitative Verhalten nicht wesentlich beeinflusst, haben wir auf diesen numerisch nicht ganz einfach zu realisierenden Teilaspekt verzichtet.

Die Simulationsbox

Um die Simulationen durchführen zu können, benötigen wir noch Randbedingungen. Wir wählen die Version der MD-Zelle von SCHADT *et al.* [56], wie sie bereits in Abbildung 4.1 vorgestellt wurde. Die Zelle wird mit kartesischen Koordinaten beschrieben; die mittlere Molekülrichtung ist der Direktor \mathbf{n} , den wir mit Twist- (φ) und Tiltwinkel (ϑ) parametrisieren: $n_x = \sin\vartheta \cos\varphi$, $n_y = \sin\vartheta \sin\varphi$ und $n_z = \cos\vartheta$. Wir stellen φ an der Oberfläche entsprechend der Tabelle 4.1 ein, ϑ wird je nach Simulationslauf unterschiedlich gewählt.

Die Einheitszelle unserer Simulationsbox besitzt die Kantenlänge $2b$ und die Dicke d . In x - und y -Richtung werden die Ränder periodisch fortgesetzt. Damit die Disklinationen nicht am Rand der Simulationsbox auftreten, verschieben wir die Einheitszelle um $b/2$ in x - und y -Richtung.

Die resultierende Oberflächenstruktur der Simulationsbox ist in Abbildung 4.3 zu sehen.

In allen Simulationen wurden die Materialparameter wie in [68] gewählt: $k_{11} = 12,4 \cdot 10^{-12} \text{ N}$, $k_{22} = 6,5 \cdot 10^{-12} \text{ N}$, $k_{33} = 19,9 \cdot 10^{-12} \text{ N}$, $\epsilon_{\parallel} = 8,03$, $\epsilon_{\perp} = 3,59$ und $\gamma_1 = 17 \cdot 10^{-3} \text{ Nsm}^{-2}$. Außerdem wurde $b = 9 \mu\text{m}$ und $d = 6 \mu\text{m}$ gewählt.

Die Gitter hatten eine Größe von 40 Punkten in allen drei Dimensionen. Die Schaltzeiten werden im Folgenden in Einheiten von Millisekunden angegeben.

Da es sich bei der MD-Zelle um eine bildschirmtaugliche Zelle handelt, ist es interessant, die optische Transmission für senkrecht zur Oberfläche einfallendes Licht (entlang der negativen z -Achse) zu berechnen. Auch in der Transmission sollten die Defektlinien sichtbar sein. Zur genaueren Beschreibung der Transmissionberechnung verweisen wir auf Anhang C.

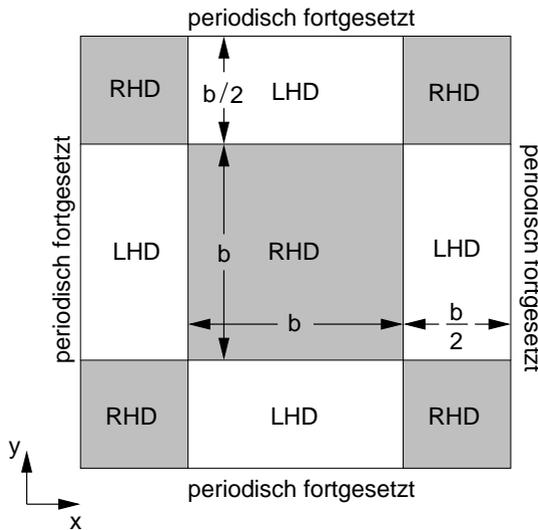


Abbildung 4.3: Simulationsbox der MD-Zelle: Im Gegensatz zu Abbildung 4.1 wurde die Einheitszelle um $b/2$ in x - und y -Richtung verschoben, um das Auftreten von Disklinationen am Rand der Simulationsbox zu vermeiden.

4.2 Die Multidomänenzelle als Displaypixel

Um die Bewegung von Defektlinien in der MD-Zelle zu studieren, erscheint es plausibel, den unteren gestrichelten Simulationspfad in Abbildung 4.2 zu wählen. Jedoch ist der Tiltwinkel $\vartheta_p^D = 58^\circ$, unterhalb dessen die Defektlinien immer vorhanden sind, sehr viel kleiner als in den Realisierungen der MD-Displays: in der Version von SCHADT *et al.* beträgt $\vartheta_p = 88,7^\circ$ [56]. Chen *et al.* haben das Auftreten von *splay canceling* im Detail studiert [69] und konnten ein MD-Display herstellen, bei dem $\vartheta_p = 65^\circ$ war.

Um diese Diskrepanz zwischen Experiment und Simulation zu klären, werden wir nun anhand einer groben Abschätzung zeigen, dass der Wert von ϑ_p^D von den Zelldimensionen abhängt. Wenn die Direktorhelix ihre Drehrichtung umkehrt, wird über das entsprechende Teilpixel eine zusätzliche Splay-Deformation aufgebracht. Die gesamte Energie von zweien solcher Teilpixel ist dann näherungsweise das Produkt aus der freien Energiedichte und dem Volumen, daher

$$F_s \simeq K \left(\frac{2(\pi/2 - \vartheta_p)}{d} \right)^2 b^2 d . \quad (4.1)$$

Die Twist-Disklinationen treten auf, falls ihre Kernenergie F_d kleiner ist als F_s . Die Kernenergie ist gegeben durch [37]

$$F_d = 8Kb , \quad (4.2)$$

wobei über die gemittelte Frank'sche elastische Konstante K die Linienenergie des Defektkerns genähert wird. Der Übergang zwischen den beiden Konfigurationen findet also statt bei $F_s \approx F_d$ oder

$$\vartheta_p^D \approx \pi/2 - \sqrt{2d/b} . \quad (4.3)$$

Mit den Parametern, die wir in den numerischen Simulationen verwendet haben ($d/b = 2/3$) erhalten wir $\vartheta_p^D = 43^\circ$. Die Abweichung zu dem in der Simulation gefundenen $\vartheta_p^D = 58^\circ$ lässt sich auf die grobe Abschätzung der freien Energie zurückführen. Jedoch zeigt Gl. (4.3) deutlich die Abhängigkeit von den Zelldimensionen. Diese betragen im

Experiment ungefähr $100\ \mu\text{m}$, während unsere Simulationsbox nur eine Kantenlänge von $b = 18\ \mu\text{m}$ hat.

Um der experimentellen Realisierung näher zu kommen, präparieren wir deshalb einen Randwinkel von $\vartheta_p = 85^\circ$. Eine defektbehaftete Konfiguration kann sich hier als metastabiler Zustand ausbilden. Dazu wird die statische Gleichung (1.18) gelöst. Anschließend schalten wir die Spannung auf $4\ \text{V}$ und starten den Zeitintegrationsalgorithmus. Für charakteristische Zeiten in der Entwicklung des Direktorfeldes werden in Abbildung 4.4 die Disklinationslinien und die Transmission der Zelle gezeigt.

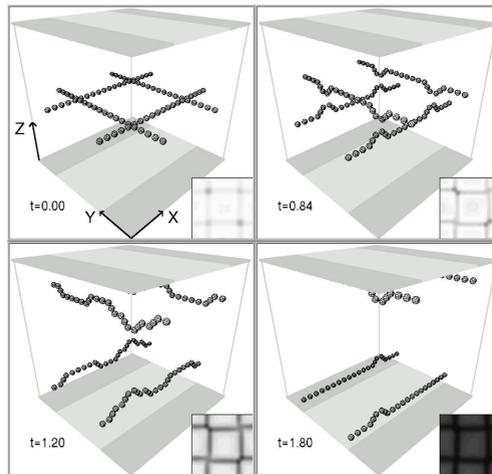


Abbildung 4.4: Schnappschüsse der Defektlinienbewegung im MD-Displaypixel und zugehörige Transmission zu verschiedenen Zeitschritten, nachdem die Zelle von $U_0 = 0\ \text{V}$ auf $4\ \text{V}$ geschaltet wurde. Die obere und untere Glasplatte ist in helle und dunkle Streifen unterteilt, die auf die unterschiedlichen Verankerungen des Direktors hinweisen sollen. Das Direktorfeld selbst ist der Übersichtlichkeit halber ausgeblendet. Zur Visualisierung der Disklinationslinien siehe Anhang C.

Bei $t = 0$ bilden die Defektlinien in der Mitte der Zelle ein Netz aus Twist-Disklinationen. Wenn die Spannung angeschaltet wird, beginnen die Disklinationen sich in Richtung der Glasplatten zu bewegen (siehe

Abbildung 4.4, $t = 0,84$ und $1,20$). An ihren Kreuzungspunkten sind die Linien aufgrund der anziehenden Kraft zueinander verbogen (siehe hierzu Abschnitt 6.1). Erst wenn der Abstand der Defektlinien groß genug ist, nämlich wenn die Linien die Oberflächen erreicht haben, glätten sie sich (siehe Abbildung 4.4, $t = 1,80$).

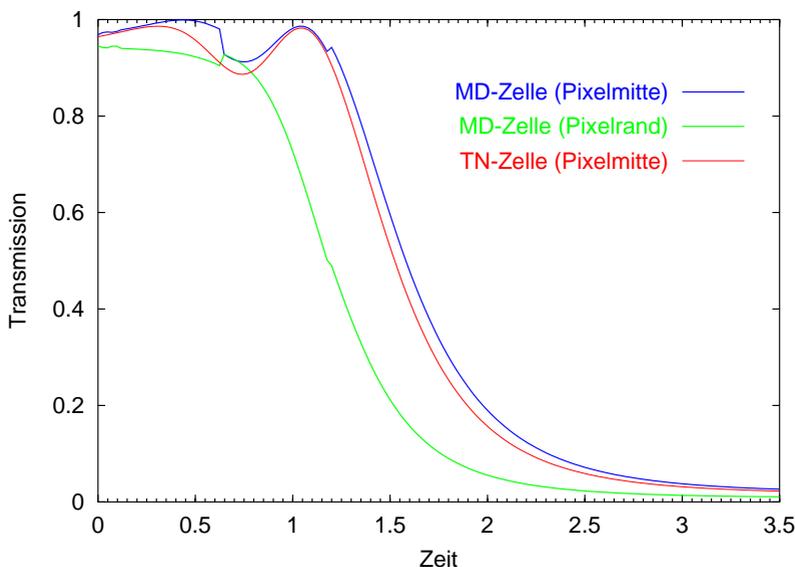


Abbildung 4.5: Lichttransmission über der Zeit im MD-Display. Blaue Kurve: im Zentrum der Zelle, grüne Kurve: nahe einer Twist-Disklination. Die rote Kurve zeigt zum Vergleich die Transmission in einer TN-Zelle.

Es ist sehr aufschlussreich, die jeweilige Lichttransmission in den rechten unteren Ecken von Abbildung 4.4 zu betrachten: Bei $t = 0$ sind die Disklinationen kaum erkennbar. Wenn die Defektlinien näher zu den Glasplatten wandern, wird der Kontrast stärker; die Defektlinien schalten also schneller als der Rest der Zelle. Dieser Sachverhalt ist quantitativ in Abbildung 4.5 dargestellt. Die Transmission dreier einzelner Helizes ist über der Zeit aufgetragen. Die blaue Kurve gibt das Schaltverhalten in

der Mitte eines Displaypixels wieder. Die Transmissionskurve verläuft annähernd parallel zu derjenigen einer reinen TN-Zelle (rote Kurve), die Schaltzeiten stimmen also überein. Da die Ausdehnung eines realen Pixels viel größer ist, schließen wir also, dass die optische Transmission der MD-Zelle von der Defektbewegung nahezu unbeeinflusst bleibt. Der Dip in der Transmission zwischen $t = 0,5$ und 1 ist ein Effekt, der bekanntermaßen in TN-Zellen mit Pretilt auftritt [70].

Abschließend noch zwei Bemerkungen: Wird die Spannung wieder abgeschaltet, so wird der hier geschilderte Vorgang reversibel invertiert. Die Position der Twist-Disklinationen als Funktion des Pretiltwinkels ϑ_p an der Oberfläche bei Spannung null ist wie folgt: Für Pretiltwinkel über $\vartheta_p = 80^\circ$ liegen die Defektlinien glatt in der Mitte der Zelle. Unterhalb von $\vartheta_p = 80^\circ$ befindet sich ihre Gleichgewichtslage immer näher bei den Glasplatten, wobei sie an ihren Kreuzungspunkte immer noch verbunden sind. An diesen Stellen sind sie zueinander gekrümmt. Bei $\vartheta_p = 60^\circ$ lösen sich die Linien von einander, wobei sie für kleinere ϑ_p noch näher zu den Platten rücken.

4.3 Die Multidomänenzelle als Mini-Defektlabor

Nach dem Einschalten der Spannung

Für den oberen gestrichelten Pfad in Abbildung 4.2 berechnen wir zunächst eine Startkonfiguration, indem wir die statischen Gleichungen (1.18) für 0V lösen. Anschließend wird wiederum die Spannung auf 4V gesetzt und die Zeitintegration gestartet. Schnappschüsse der Disklinationslinien zu bestimmten Zeiten sowie die zugehörige Transmission werden in Abbildung 4.8 illustriert.

Bei $t = 0,0$ haben alle Helizes den gleichen Drehsinn. Die Helizes der RHDs (vgl. Abbildung 4.3) drehen so, wie es aufgrund ihrer Randbedingungen am günstigsten ist. Die Helizes in den LHDs haben ihren Drehsinn invertiert und tragen nun eine zusätzliche Splay-Deformation, die über die gesamte Helix verteilt ist. Es liegen keine Disklinationen vor.

Nun wird die Spannung von 4V angelegt und die Direktoren beginnen, sich entlang des elektrischen Feldes auszurichten. Bei $t = 3,6$ ist ein

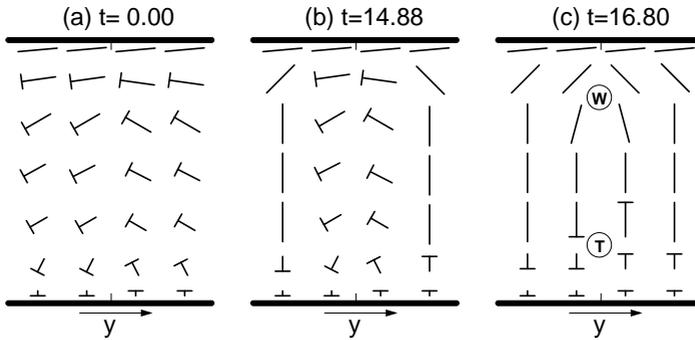


Abbildung 4.6: Nagelbild zur Illustration des Mechanismus, durch den die Defektringe in der MD-Zelle geöffnet werden. Die Länge eines Nagels ist gegeben durch die Projektion des Direktors auf die Zeichenebene. Der Kopf markiert den Teil des Direktors, der unter der Zeichenebene liegt. a) Ungestörte Helices, die dritte und vierte Helix haben ihren Drehsinn auf Kosten einer zusätzlichen Splay-Deformation umgekehrt. Die Helices gehören zu dem mit einem Pfeil markierten Pfad in Abbildung 4.8. b) Nach dem Anlegen des elektrischen Feldes werden die erste und vierte Helix zerstört. c) Durch das Einführen einer Twist-Disklination (T) und einer $+1/2$ -Wedge-Disklination (W) können auch die Direktoren der zweiten und dritten Helix entlang des elektrischen Feldes ausgeleitet werden.

deutlicher Unterschied zwischen den zwei Helixtypen erkennbar. In den RHDs ist die Transmission bereits nahe bei Null; die Helix ist zerstört, da die Direktoren nahezu parallel zum elektrischen Feld ausgerichtet sind. In den LHDs ist die Transmission nahezu unverändert. Die Helixstruktur ist immer noch vorhanden. Wir können dieses Phänomen mit Hilfe der Nagelbilder in Abbildung 4.6 verstehen: (a) bis (c) zeigen jeweils das Direktorfeld von vier Helices an verschiedenen Positionen y (vgl. die gestrichelten Pfeile in Abbildung 4.8).

In der ersten und zweiten Helix in Abbildung 4.8(a) sind alle Direktoren bereits in Richtung des elektrischen Feldes ausgerichtet. Nach Anlegen der Spannung können sie sich sofort weiter ausrichten. Die Direktoren der dritten und vierten Helix jedoch, deren Drehsinn invertiert ist, sind

durch die zusätzliche Splaydeformation zunächst stabilisiert: In der Helix befindet sich ein waagrecht ausgerichteter Direktor.

Bei $t = 14,88$ sind auch die Direktoren der LHDs entlang des elektrischen Feldes ausgerichtet, zwischen den Domänen bleiben jedoch weiße Streifen zurück. Diese Konfiguration ist in Abbildung 4.6(b) dargestellt, die weißen Streifen entsprechen der Situation bei der zweiten und dritten Helix. Die Direktoren dieser Gebiete können nur ausgerichtet werden, indem eine $+\frac{1}{2}$ Wedge- (W) und eine Twist-Disklination (T) entsteht, wie in Abbildung 4.6(c) zu sehen. Diese Disklinationen sind Bestandteil eines der zwei Ringdefekte die sich in der x - y -Ebene zum Zeitpunkt $t = 14,88$ öffnen. Die Ringe wachsen an, bis sie sich schließlich bei $t = 17,66$ berühren und annihilieren. Zurück bleibt eine Wedge-Disklination an der oberen Platte und eine Twist-Disklination an der unteren. Bis $t = 32,35$ glätten sich die Defektlinien. Durch die Entstehung der Defektlinien ist der weiße Streifen in der Transmission verschwunden.

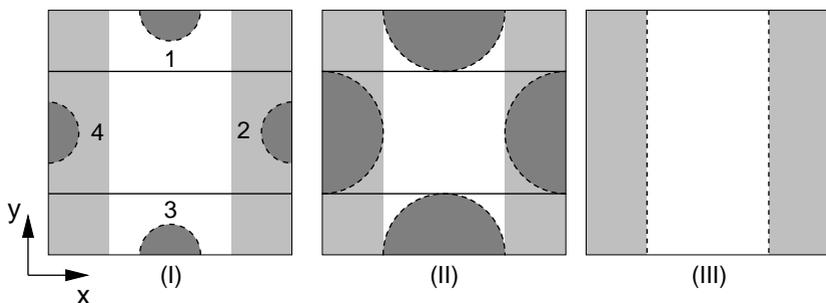


Abbildung 4.7: Hypothetischer Mechanismus zur Drehung der Defektlinien in der Nähe der oberen Platte um 90° . (I) Disklinationsringe öffnen sich in den Regionen 1 bis 4. (II) Die Ringe annihilieren teilweise mit den bestehenden Defektlinien. (III) Das Ergebnis sind Twist-Disklinationen entlang der y -Achse.

Bei $t = 32,35$ schließlich ist die Simulation in einem lokalen Minimum gefangen. Um das globale Minimum zu erreichen, muss zunächst ein zweites Paar von Disklinationslinien entstehen, um den zweiten weißen Streifen zu vernichten. Da dann die Defektlinien an der oberen Platte

noch in die falsche Richtung zeigen, müssen sie noch um 90° gedreht werden. Hierzu schlagen wir den folgenden Mechanismus vor:

In Abbildung 4.7(I) sind nur die Defektlinien der oberen Platte gezeichnet. In den Flächen 1 bis 4 ist die zusätzliche Splay-Deformation immer noch vorhanden. Untersucht man das Direktorfeld in der Nähe der Platte, so stellt man fest, dass durch das Öffnen von weiteren Ringdefekten in der Ebene der Platte und der Rekombination mit den vorhandenen Disklinationen eine solche Drehung bewerkstelligt werden kann (siehe Abbildung 4.7(III)). Der Charakter der Ringdefekte in Abbildung 4.7 ist rechts und links vom Twisttyp und oben und unten vom Wedgetyp. Die letzteren annihilieren mit den existierenden Wedge-Disklinationen und die Twist-Anteile ergeben die neuen Liniendefekte entlang der y -Achse. Im globalen Minimum besitzt das Direktorfeld also wieder zwei Paare von Disklinationen, welche parallel zu den Streifen der Oberflächenstruktur liegen. Eine solche Konfiguration verwenden wir nun als Ausgangspunkt für den Ausschaltvorgang, wie er in Abbildung 4.9 zu sehen ist.

Nach dem Abschalten der Spannung

In Abbildung 4.9 zeigen wir die Entwicklung der MD Zelle nach dem Abschalten der Spannung bei $t = 0,0$. Wiederum ist neben den Defektlinien auch die Transmission für jeden Zeitschritt angegeben.

Bei $t = 0,0$ sind die Direktoren in Richtung des elektrischen Feldes ausgerichtet. Die Helizes sind zerstört, die Transmission ist Null. Die Twist-Disklinationen sind nahe der Oberfläche lokalisiert. Nach dem Ausschalten der Spannung treiben die elastischen Drehmomente das System zurück ins Gleichgewicht. Bei $t = 2,42$ sind die Helizes in den LHDs und RHDs wieder hergestellt.

Die Direktorkonfiguration ist nun wieder in der Lage, die Polarisation des Lichtes zu drehen, die Transmission ist fast am Maximum angelangt. Abbildung 4.9, $t = 2,42$, zeigt, dass die Defektlinien in die Mitte der Zelle wandern. Sie sind in der Transmission noch deutlich zu erkennen. Bei $t = 5,36$ beginnen die Defektlinien, sich in den Kreuzungsgebieten aufeinander zuzubiegen. Schließlich beginnen die Disklinationen bei $t = 6,77$ zu rekombinieren; dieser Vorgang ist bei $t = 12,12$ abgeschlossen. Bis hierhin ist die Konfiguration mit der in Abschnitt 4.2 vergleichbar, wo sich ebenfalls ein Netz von Disklinationen in der Mitte der Zelle

befindet. Nun brechen jedoch die Schnittpunkte auf und zwei neue Defektlinien entstehen (siehe Abbildung 4.9, $t = 17, 64$). Diese glätten sich bis $t = 42, 00$. Sie trennen Domänen mit rechts- und linksdrehenden Helizes.

An dieser Stelle wird unsere Simulation wieder in einem lokalen Minimum festgehalten; die Konfiguration ändert sich nicht mehr. Das globale Minimum wären wie oben beschrieben Helizes, die nur noch einen Drehsinn besitzen. Es könnte durch das folgende Szenario erreicht werden: Bei $t = 12, 12$ brechen die Schnittpunkte der Disklinationen so auf, dass in der Mitte ein Defektring entsteht. Dieser zieht sich immer mehr auf einen Punkt zusammen und verschwindet schließlich, zurück bleibt eine defektfreie Konfiguration. Wir konnten durch unsere Simulationen nicht klären, ob dieses Szenario wegen numerischer Ungenauigkeiten oder der definierten Weise, in der die Kreuzungspunkte aufbrechen müssen, nicht auftrat.

Abschließende Bemerkungen

Das Konzept der MD-Zelle entsprang der Notwendigkeit, den Blickwinkel von konventionellen Flüssigkristall-Displays zu verbessern, die auf der TN-Technik basieren. In diesem Kapitel haben wir eine spezielle Realisierung einer MD-Zelle genauer untersucht.

Wir haben gesehen, dass die Simulation im Direktorbild durchaus in der Lage ist, komplexe Vorgänge richtig wiederzugeben. Es bleiben jedoch zwei schwerwiegende Nachteile. Zum einen wird der Defektkern nicht richtig wiedergegeben. Hier kann nur eine erweiterte Theorie mit einem tensoriellen Ordnungsparameter weiterhelfen, wie wir sie in Kapitel 1 und 2 entwickelt haben. Ein weiteres Problem ist die Vernachlässigung der Kopplung des Direktorfeldes an das Geschwindigkeitsfeld. Auch dieser Aspekt wird in der tensoriellen Hydrodynamik berücksichtigt.

Da wir nun ein Verständnis für die mesoskopischen Effekte, die im Zusammenhang mit Defektlinien auftreten, entwickelt haben, wollen wir nun gleichsam in das System hineinzoomen. Wie sieht der Kern einer Defektlinie wirklich aus und wie wird er durch Strömungen im Flüssigkristall beeinflusst?

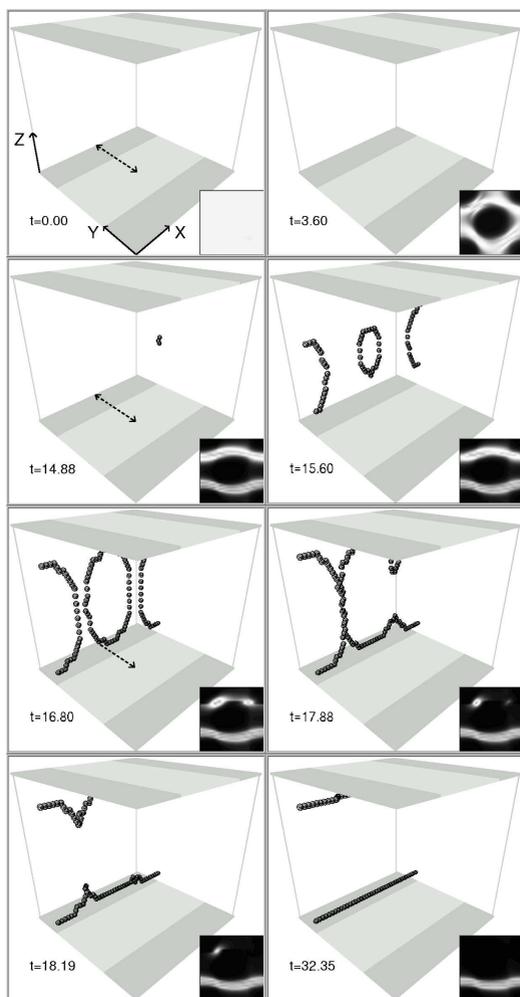


Abbildung 4.8: Schnappschüsse des Entstehens der Disklinationen in der MD-Zelle und zugehörige Transmission zu verschiedenen Zeitschritten, nachdem die Zelle von $U = 0$ V auf 4 V geschaltet wurde. Die obere und untere Glasplatte ist in helle und dunkle Streifen unterteilt, die auf die unterschiedlichen Verankerungen die Direktors hinweisen sollen.

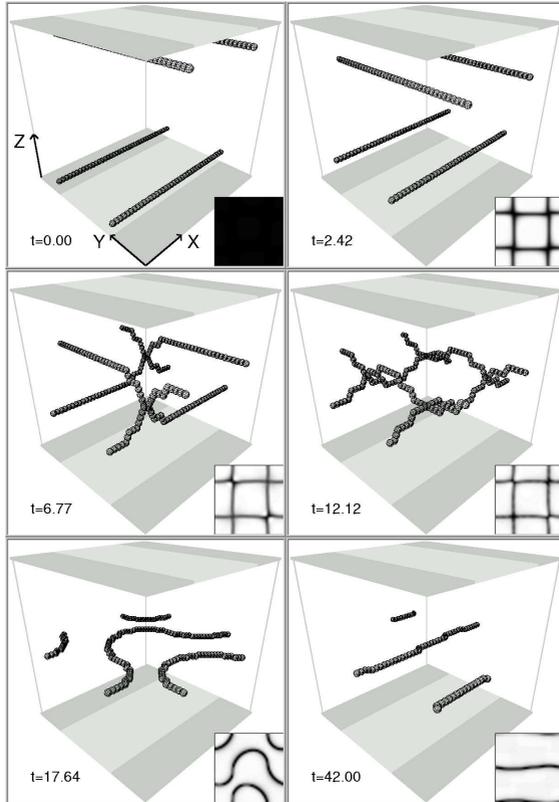


Abbildung 4.9: Schnappschüsse des teilweisen Verschwindens der Disklinationen in der MD-Zelle und zugehörige Transmission zu verschiedenen Zeitschritten, nachdem die Zelle von $U = 4 \text{ V}$ auf 0 V geschaltet wurde. Die obere und untere Glasplatte ist in helle und dunkle Streifen unterteilt, die auf die unterschiedlichen Verankerungen die Direktors hinweisen sollen.

Übergang zum Ausrichtungstensor

In Kapitel 4 haben wir gesehen, wie sich die Multidomänenzelle als Defektlabor einsetzen lässt, in dem die Entstehung, Bewegung und Vernichtung von Disklinationen untersucht werden kann. Da die Geometrie der MD-Zelle sehr komplex ist, haben wir von einer Kopplung des Ordnungsparameters an die Geschwindigkeiten abgesehen. Diese spielt jedoch insbesondere bei der Bewegung von Disklinationen eine wichtige Rolle [71, 14]. Wir haben aus diesem Grund in Kapitel 2 und 3 die hydrodynamischen Gleichungen für den tensoriellen Ordnungsparameter abgeleitet. Bevor wir jedoch die Wechselwirkung der Defektlinie mit dem Geschwindigkeitsfeld im Detail untersuchen, wollen wir uns zunächst eine Übersicht über die Konfigurationsänderungen verschaffen, die ein tensorieller Ordnungsparameter mit sich bringt.

5.1 Dünne Filme

In Kapitel 1 haben wir uns mit den verschiedenen nematischen Ordnungsparametern auseinander gesetzt. Wir haben angedeutet, dass das Zusammenspiel von elastischer und Volumenenergie die lokale Ordnung bestimmt. In diesem Kapitel wollen wir hierzu eine quantitative Analyse liefern und widmen uns deshalb einem rein statischen Problem.

Im vorangegangenen Kapitel haben wir die TN-Zelle kennengelernt. Der Flüssigkristall wird zwischen zwei Glasplatten gebracht, an deren Oberflächen er so verankert ist, dass die Moleküle eine Helix ausbilden. Schickt man linear polarisiertes Licht entlang dieser Helix durch den Flüssigkristall, so wird die Polarisationsrichtung mit der Helix gedreht [72]. Durch das Anlegen einer elektrischen Spannung kann die Helix und somit die Drehwirkung des Flüssigkristalls zerstört werden. Auf diesem Prinzip basieren Flüssigkristall-Displays.

Bei typischen Displays weisen die Platten in einen Abstand von $d = 5 - 10 \mu\text{m}$ auf. Setzen wir diesen Abstand als charakteristische Länge b in (3.2) und (3.3) ein, so sehen wir, dass die elastische Energie um einen

Faktor

$$\frac{\xi_R^2}{b^2} = \frac{\xi_R^2}{d^2} = \left(\frac{1,39 \cdot 10^{-2} \mu\text{m}}{5 \mu\text{m}} \right)^2 = 7,73 \cdot 10^{-6} \quad (5.1)$$

kleiner ist als die Volumenenergie. Für das System kann also der uniaxiale Ordnungsparameter zur Beschreibung verwendet werden.

Die elastische Energie dieser Anordnung ist proportional zum Kehrwert des Plattenabstandsquadrates. Die Verdrillung des Flüssigkristalls zwischen den beiden Platten bleibt konstant; wird der Abstand d verkleinert, so findet die Verzerrung daher auf immer kürzeren Längenskalen statt und die elastische Energie steigt an. Bringt man die Platten z.B. bis auf einen Abstand von $d = 10 \xi_R$ zueinander, so wird die elastische Energie nur noch mit einem Faktor

$$\frac{\xi_R^2}{d^2} = 10^{-2} \quad (5.2)$$

skaliert. Wir dürfen dann nicht mehr von einem uniaxialen Ordnungsparameter ausgehen, sondern müssen die Summe aus Volumen- und elastischer Energie gleichzeitig betrachten. Das System wird ab einem bestimmten Plattenabstand in biaxiale Zustände ausweichen.

Der numerische Versuchsaufbau

Die Simulationsbox ist wie folgt definiert. An den beiden Glasplatten bei $z = 0$ und $z = d$ halten wir den Flüssigkristall fest. Das dazwischenliegende Volumen wird diskretisiert. Wir denken uns die Platten in x - und y -Richtung periodisch fortgesetzt, simulieren also eine eindimensionale Anordnung.

Auf den Glasplatten geben wir den \mathbf{Q} -Tensor für die Temperatur $t = -1$ uniaxial vor, wie wir es in Kapitel 3.5 beschrieben haben. Der Direktor an der unteren Platte bildet mit dem Direktor an der oberen Platte einen Winkel von 90° . Beide Direktoren liegen in der Ebene der Glasplatten, da die Drehrichtung der Helix in diesem Kapitel keine Rolle spielt¹. Alle weiteren Parameter der Simulationen findet man in Anhang B. Den Plattenabstand d geben wir in Einheiten der Korrelationslänge ξ_R an.

¹Die Versuchsanordnung entspricht damit z.B. einer RHD in Abbildung 4.1 mit $\vartheta_p = 0$.



Abbildung 5.1: Dreidimensionale Aufsicht auf die Konfigurationen. Bei $d = 5 \xi_R$ ist die uniaxiale Helix ausgebildet (links). Für $d = 2 \xi_R$ steigt die Biaxialität zwischen den Platten an, die Helixstruktur bleibt jedoch erhalten (Mitte). Im Grenzfall $d = \xi_R$ ist nur noch der Eigenwertübergang erkennbar (rechts). Zwischen den oblaten und prolaten \mathbf{Q} -Tensoren in der Zellmitte und an den Platten wird die Biaxialität maximal.

Mit Hilfe des Finite-Elemente-Verfahrens minimieren wir zu verschiedenen Plattenabständen d die Summe aus elastischer Energie (3.3) und Volumenenergie (3.2). Den \mathbf{Q} -Tensor können wir dann wie in Anhang C beschreiben visualisieren.

5.2 Der Eigenwertübergang

In Abbildung 5.1 ist der Tensor-Ordnungsparameter für verschiedene Plattenabstände d dargestellt. Wir schauen entlang der Helixachse auf die obere Glasplatte². Die Farbkodierung zeigt das Biaxialitätsmaß M_{biax} als Funktion der z -Koordinate. Man erkennt den festgehaltenen uniaxialen \mathbf{Q} -Tensor an der oberen und unteren Glasplatte.

Bis $d = 5 \xi_R$ ist eine nahezu perfekte Helix zu erkennen, wobei der Farbverlauf bereits schwache Variationen in M_{biax} andeutet. Auch bei $d = 2 \xi_R$ ist die Helix noch vorhanden. Allerdings bildet sich in der Mitte zwischen den Platten ein Bereich stärkerer Biaxialität aus. Im Grenzfall $d = \xi_R$ schließlich ist von der Helix nichts mehr zu sehen. Stattdessen

²Die Darstellung ist nicht perspektivisch.

zeigt die Farbkodierung einen Übergang vom uniaxialen Rand (blau) über Zustände maximaler Biaxialität (rot) hin zu oblat uniaxialen \mathbf{Q} -Tensoren in der Zellmitte (ebenfalls blau).

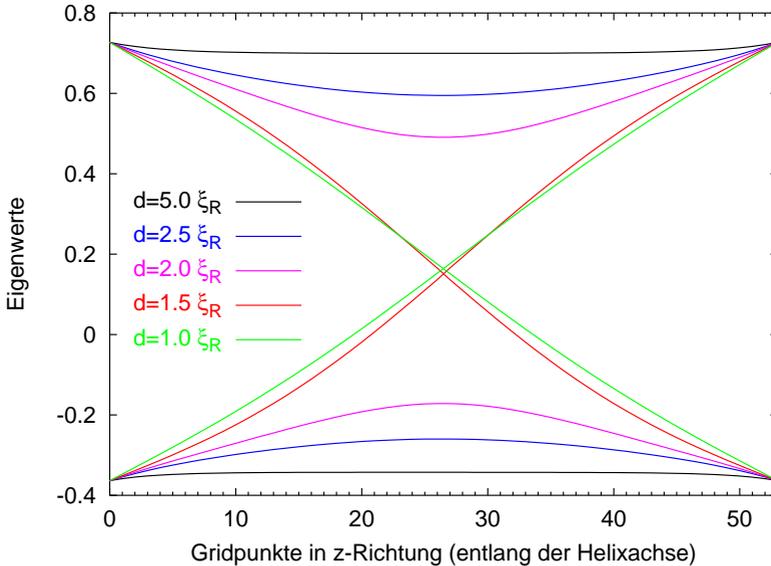


Abbildung 5.2: Vergleich der Eigenwerte der Tensoren über der Helixachse. Zur besseren Übersicht erfolgt die Auftragung gegen die Anzahl der Gitterpunkte, die bei allen drei Konfigurationen gleich groß ist. Je zwei Kurven gehören zu einer Zelldicke. Der Eigenwert, der zum Eigenvektor in z -Richtung gehört, ist nicht gezeichnet. Sein Verlauf entspricht für alle Plattenabstände dem des negativen Eigenwertes für $d = 5, 0 \xi_R$.

Zum besseren Verständnis sind in Abbildung 5.2 die Eigenwerte über den Gridpunkten entlang der Helixachse aufgetragen. Der dritte Eigenwert, der entlang der z -Richtung liegt, ist in den Übergang nicht involviert. Er bleibt konstant. Die beiden Eigenwerte, die in der x - y -Ebene liegen, nähern sich einander in der Zellmitte für $d \rightarrow \xi_R$.

Es fällt auf, dass für $d = 5 \xi_R$ das Volumen nicht die Eigenwerte des am Rand vorgegebenen \mathbf{Q} -Tensors annimmt. Da die Abweichung bei

beiden Eigenwerten gleich groß ist, bleibt der Ordnungsparameter auch hier noch uniaxial. Diese Abweichung zeigt, dass sich das System bereits sehr nahe am Übergang befindet.

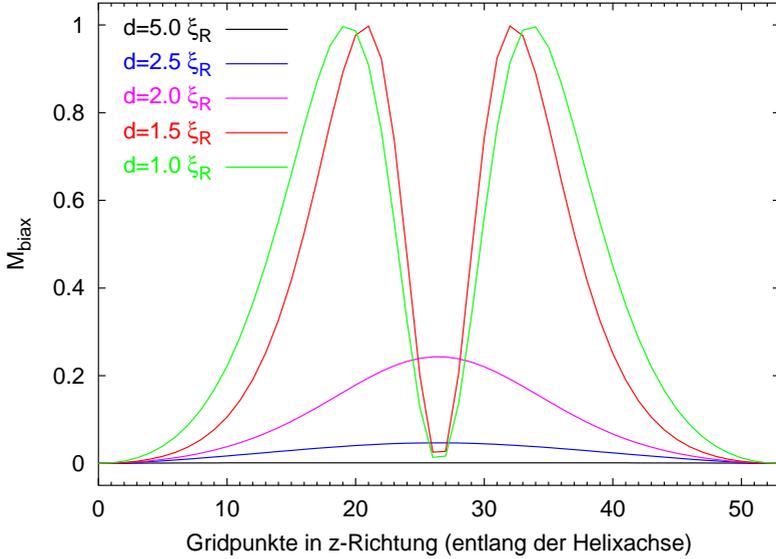


Abbildung 5.3: Biaxialitätsmaß für Helizes verschiedener Plattenabstände. Deutlich ist das prolate uniaxiale Minimum für $d = \xi_R$ bei 26,5 Gitterpunkten.

Abbildung 5.3 zeigt das Biaxialitätsmaß entlang der Helixachse. Zunächst steigt die Biaxialität stark an. Ein maximal biaxialer Ordnungsparameter stellt jedoch nicht das Maximum der Volumenenergie dar. Dieses ist vielmehr gegeben durch einen oblaten uniaxialen \mathbf{Q} -Tensor, der sich in der Zellmitte ausbildet. Da eine gerade Anzahl von Gitterpunkten simuliert wurde, sinkt die Biaxialität in der Zellmitte nicht auf Null.

Man kann das Verhalten also wie folgt zusammenfassen: Das Verhältnis zwischen elastischer und Volumenenergie bestimmt, wann biaxiale bzw. oblate \mathbf{Q} -Tensoren energetisch bevorzugt sind. Geht d gegen ξ_R , so wird

die uniaxiale Helix ausgebildet. Mit kleiner werdendem d nimmt die Biaxialität zu; die Helix wird immer stärker deformiert. Im Grenzfall $d = \xi_R$ schließlich ist die Helix nicht mehr erkennbar, sie wird ersetzt durch einen reinen Eigenwertübergang. Wie aber hängt die explizite Abhängigkeit des Übergangs vom Verhältnis der Energien ab?

Energiebetrachtung

Wir haben die Volumen- und die elastische Energie, sowie deren Summe in Abbildung 5.4 für eine spezielle Wahl von k_{22} über dem Plattenabstand aufgetragen. Da das System nahezu frei von *bend-* und *splay-*Verzerrungsmoden ist, wird die elastische Energie zweckmäßigerweise durch k_{22} parametrisiert.

Wie mittlerweile mehrfach erwähnt, lassen sich wiederum zwei Bereiche finden: Für große Plattenabstände ist die elastische Energie verschwindend gering; das Minimum ist durch die Volumenenergie uniaxial vorgegeben. Die elastischen Energie bestimmt die Orientierung im Raum. Wird der Plattenabstand noch weiter vergrößert, so verschwindet der Anteil der elastische Energie in der Rechengenauigkeit der numerischen Simulation. Der Plot veranschaulicht also für große d die in Abschnitt 3.1 angesprochene Grenze für die numerische Simulation.

Im Bereich des Übergangs steigt die elastische Energie stark an, bis sie bei der kritischen Dicke d_{krit} gerade so groß ist wie die Volumenenergie. Wir haben die kritische Dicke in Abhängigkeit von k_{22} im Inset von Abbildung 5.4 dargestellt: Der Zusammenhang ist linear, da die elastische Energie linear von k_{22} abhängt. Lässt man k_{22} gegen Null streben, so kann das System auch bei extrem kleinen Plattenabständen eine Twist-Verzerrung aufrechterhalten. Der Übergang erfolgt dann für $d \rightarrow 1$.

Es sei noch erwähnt, dass der Übergang für verschiedene Startkonfigurationen bei leicht unterschiedlichen Plattenabständen stattfindet. Startet man mit einer uniaxialen Helix, so findet er bei kleinerem d statt, als wenn man den biaxialen Übergang vorgibt.

Der Einfluß der Volumenenergie

Wir haben bisher den Eigenwertübergang in Abhängigkeit von k_{22} betrachtet. Der kritische Plattenabstand hängt jedoch noch von einer zweiten Größe ab: dem Koeffizienten β des kubischen Terms in der Volumenenergie.

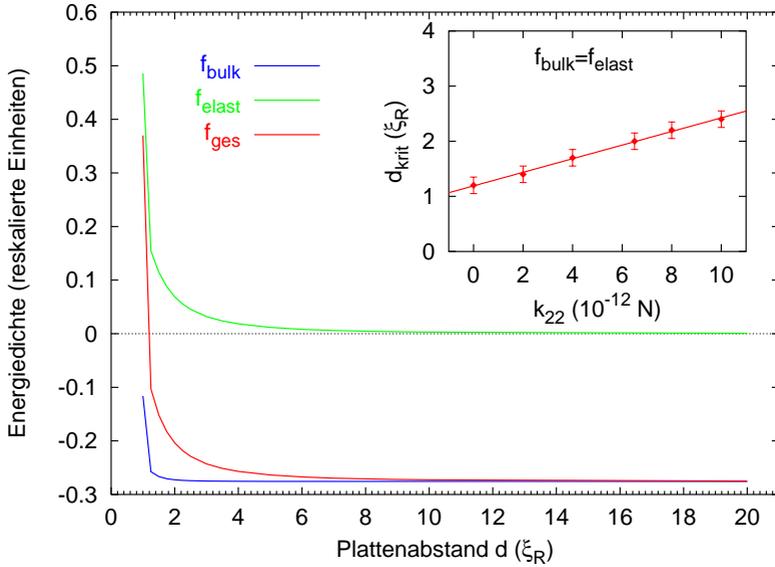


Abbildung 5.4: Verlauf der Energiedichten beim Twistübergang für $k_{22} = 6,5 \cdot 10^{-12}$ N. Gezeichnet sind die gesamte, sowie die Volumen- und elastische Energiedichte. In der rechten oberen Ecke ist zusätzlich der Verlauf des kritischen Plattenabstands d_{krit} über k_{22} gezeichnet, bei dem die elastische Energiedichte gleich der Volumenenergiedichte wird. Da wir die Energiekurven nur für endlich viele Plattenabstände bestimmt haben, ergeben sich beim Ablesen von d_{krit} kleine Fehlerbalken. Die durchgezogene Linie ist eine Fitgerade.

In Kapitel 1.1 hatten wir gesehen, dass für vernachlässigbar kleine kubische Terme der Ordnungsparameter durch die Vier-Sphäre gegeben ist. Es gilt $\text{sp}\mathbf{Q}^2 = \text{const}$. Abbildung 5.5 oben zeigt, dass dessen Wert in unserem System nur für Plattenabstände $d \gg 5 \xi_R$ gilt, wo M_{biax} jedoch praktisch Null ist.

Der Term $\text{sp}\mathbf{Q}^3$ selbst ist in Abbildung 5.5 unten dargestellt. Die negativen Werte weisen auf einen nahezu uniaxialen, jedoch oblaten \mathbf{Q} -Tensor hin. Dieser stellt das Maximum der Volumenenergie dar. Wird also β , der Vorfaktor des kubischen Terms kleiner, so sinkt auch das Maximum der Volumenenergie, die elastische Verzerrung wird begünstigt.

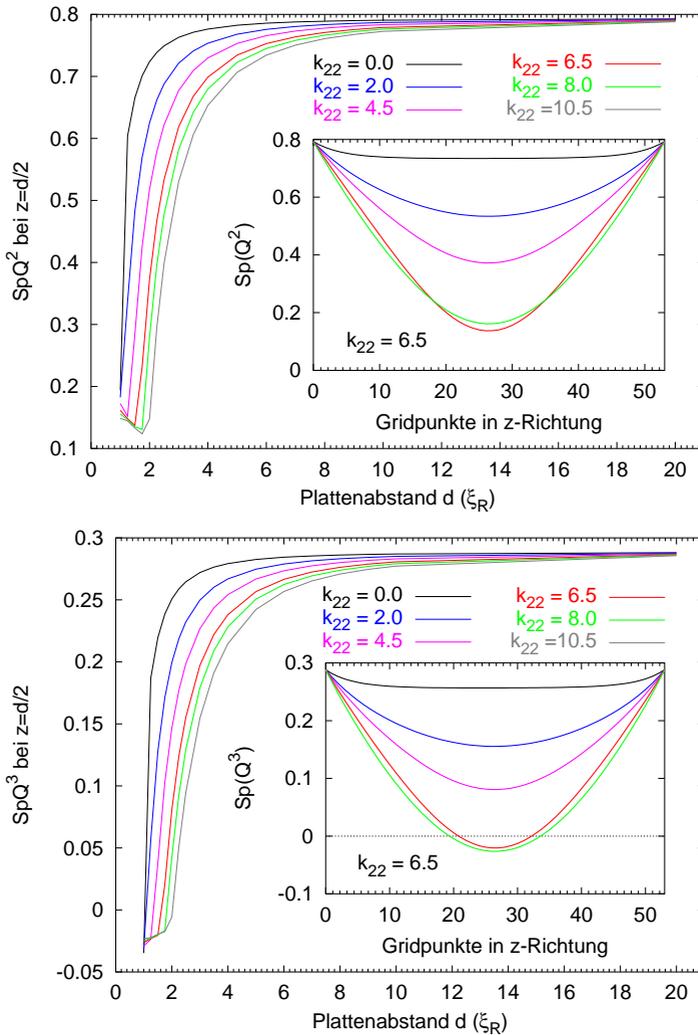


Abbildung 5.5: Vergleich der Tensoren bei $z = d/2$ für verschiedene elastische Twist-Konstanten. Im Inset ist jeweils spQ^2 bzw. spQ^3 über der Helixachse für verschiedene d geplottet. Die Legende zur Farbkodierung des Insets findet man in Abbildung 5.3 oder 5.2.

Da β linear in die Volumenenergie eingeht, ist die Abhängigkeit ebenfalls linear.

Abschließend sei erwähnt, dass man den Übergang von einer reinen Verzerrungsmode hin zum Eigenwertaustausch auch in Hybridzellen beobachten kann [73, 74]. Dabei wird der Flüssigkristall an der oberen Platte homöotrop, an der unteren planar verankert. Der Übergang kann dann verglichen werden mit der Transformation einer Bloch-Wand in eine Néel-Wand in magnetischen Systemen [75].

Wir haben in diesem Kapitel ein System untersucht, in dem unter bestimmten äußeren Randbedingungen die Helixstruktur des Flüssigkristalls durch einen Eigenwertaustausch ersetzt wird. Dabei haben wir uns die damit verbundenen charakteristischen Größen angesehen und den Übergang in Abhängigkeit der elastischen Konstanten und der Schichtdicke untersucht.

Im nächsten Kapitel wollen wir nun Konfigurationen untersuchen, in denen Biaxialität nicht durch die Topologie der Randbedingungen aufgeprägt, sondern durch die Existenz von Disklinationenkernen induziert wird.

Disklinationsdynamik im Ausrichtungstensorbild

Die Dynamik der Disklinationslinien, die wir in der Multidomänenzelle beobachten konnten, haben wir durch die numerische Lösung vereinfachter hydrodynamischer Gleichungen erhalten. Außerdem haben wir den Flüssigkristall im Direktorbild beschrieben. Wir haben gezeigt, dass das qualitative Verhalten der Disklinationen dennoch richtig wiedergegeben wird. Insbesondere im Hinblick auf die komplexe Geometrie der Zelle war dieses Vorgehen gerechtfertigt.

In diesem Kapitel wollen wir die Dynamik der Disklinationslinien mit der tensoriellen Hydrodynamik untersuchen. Dabei reduzieren wir die Geometrie auf das Wesentliche. Wir simulieren, wie sich die Fließgeschwindigkeiten ändern, wenn der Defektkern einem homogenen Geschwindigkeitsfeld ausgesetzt ist. Die Eigenschaften einer sich bewegenden Disklinationslinie erhalten wir, wenn wir in das Bezugssystem wechseln, in dem die Fließgeschwindigkeiten ruhen.

Im Rahmen der tensoriellen Hydrodynamik sind wir in der Lage, die Kerne von Disklinationslinien korrekt wiederzugeben. Außerdem werden die Kopplungen des Ordnungsparameterfeldes an die Fließgeschwindigkeiten berücksichtigt. Letztere zeigen sich bereits bei Simulationen von TN-Zellen im Rahmen der Leslie-Ericksen-Theorie. Umordnungen des Direktorfeldes induzieren Fließgeschwindigkeiten, die ihrerseits wiederum Auswirkungen auf das Direktorfeld haben. Dieser Effekt wird als *backflow* [76] bezeichnet.

6.1 Annihilation von Defekten

In [14] haben TOTH, DENNISTON und YEOMANS die Annihilation zweier halbzahliger Defekte mit unterschiedlichem Vorzeichen untersucht. Hierzu wurden die hydrodynamischen Gleichungen für den tensoriellen Ordnungsparameter mittels eines Lattice-Boltzmann-Verfahrens [17] in zwei Dimensionen gelöst.

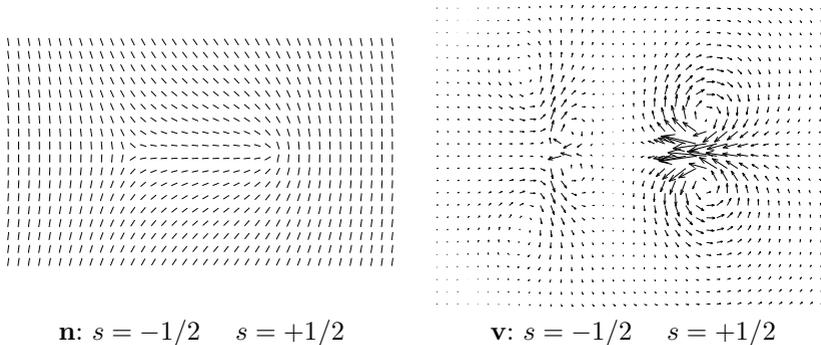


Abbildung 6.1: Annihilation der beiden halbzahigen Defekte aus [14]. Links: Schnappschuss der \mathbf{Q} -Tensor-Konfiguration; gezeichnet ist die größte Halbachse, die dem Direktor \mathbf{n} entspricht. Rechts: Geschwindigkeitsfeld zum selben Zeitpunkt. Der $-\frac{1}{2}$ -Defekt bewegt sich nach rechts, der $+\frac{1}{2}$ -Defekt nach links.

Stehen sich eine $-\frac{1}{2}$ - und eine $+\frac{1}{2}$ -Disklination¹ im Abstand D gegenüber (parallele Ausrichtung), so bewegen sie sich aufgrund einer anziehenden Kraft aufeinander zu (vgl. Abbildung 6.1). In einem Abstand $r \gg D$ ist das \mathbf{Q} -Tensorfeld homogen ausgerichtet; die topologische Gesamtladung ist $-\frac{1}{2} + \frac{1}{2} = 0$. In der Nähe der Disklinationen ($r \approx D$) ist das Ordnungsparameterfeld jedoch stark verzerrt. Die zugehörige elastische Energie ist umso niedriger, je näher sich die beiden Disklinationen kommen und wird für $D = 0$ verschwinden. Die Kraft pro Längeneinheit der Disklinationslinie kann im Grenzfall der Einkonstantennäherung² für das Direktorbild berechnet werden. Dabei wird dem Kern ein Abschneideradius R_c zugeordnet, damit die Energien und Kräfte nicht divergieren. Für Abstände $D > 2 R_c$ gilt dann [20]

$$F_{\text{attract}} = \frac{1}{2} \pi K \frac{1}{D} . \quad (6.1)$$

¹Da wir den Querschnitt der Disklinationslinien betrachten, können wir die Homotopiegruppe $\pi_1(P^1) = \frac{1}{2}\mathbb{Z}$ des ebenen Nematens zur Charakterisierung verwenden.

²In der sogenannten Einkonstantennäherung sind alle elastischen Konstanten gleich groß: $K = k_{11} = k_{22} = k_{33}$. Dadurch vereinfacht sich die elastische Energie im Direktorbild zu $f_{\text{elast}}^{\text{EK}} = \frac{1}{2} K (\partial_\alpha n_\beta)(\partial_\alpha n_\beta)$.

F_{attract} ist proportional zum Kehrwert des Abstandes D der Kerne. Dieser beschleunigenden Kraft auf die Kerne wirkt eine Reibungskraft entgegen. Aus dem Gleichgewicht der Kräfte folgt die Geschwindigkeit der Disklinationsbewegung. Treffen die beiden Defekte aufeinander, so vernichten sie sich gegenseitig. Eine defektfreie Konfiguration bleibt zurück. TOTH *et al.* finden in ihrer Arbeit unterschiedliche Geschwindigkeiten für die $\pm\frac{1}{2}$ -Defektkerne. So bewegt sich der positiv-halbzahlige Defekt nahezu doppelt so schnell wie der negativ-halbzahlige. Dieses Verhältnis bleibt konstant, auch wenn sich der Abstand verringert, die anziehende Kraft also größer wird.

Den Unterschied zwischen den beiden Geschwindigkeiten führen die Autoren auf den *backflow*-Effekt zurück. Wie in Abbildung 6.1, rechts deutlich zu sehen ist, bilden sich oberhalb und unterhalb der Kerne Wirbel aus, deren Ursache in der Kopplung des Ordnungsparameters an die Fließgeschwindigkeiten liegt. Da die Drehimpulsbilanz wiederum Gradienten von \mathbf{v} enthält, kann die Defektbewegung beschleunigt oder abgebremst werden.

Während TOTH *et al.* mit ihrer Simulation insbesondere das Fernfeld um die Disklinationen abdecken, wollen wir im Folgenden den Beitrag des Defekt*kerne*s detailliert untersuchen. Dazu gehen wir zunächst auf die statischen Konfigurationen und Eigenschaften von Disklinationslinien ein. Anschließend bestimmen wir die Reibungskraft auf die Disklinationslinien der Stärke $s = \pm\frac{1}{2}$, indem wir sie einer homogenen Strömung aussetzen. Schließlich vergleichen wir unsere Ergebnisse mit denjenigen von TOTH *et al.*

6.2 Disklinationen im \mathbf{Q} -Tensorbild

Betrachtet man das Fernfeld von Disklinationen der Stärke $\pm\frac{1}{2}$, so unterscheiden sich die Disklinationen aufgrund ihrer elastischen Energie. Dies ist jedoch nur der Fall, wenn mindestens zwei elastische Konstanten unterschiedlich groß sind (die Energie also nicht in der Einkonstantennäherung angenommen wird).

In diesem Abschnitt werden wir die Kerne der Disklinationslinien betrachten. Diese besitzen im Gegensatz zum Fernfeld bereits in der Einkonstantennäherung unterschiedliche Energie.

Zur Berechnung der Konfigurationen verwenden wir die in Kapitel 3 ab-

geleitete reskalierte freie Energie (3.1) und minimieren diese mittels eines Finite-Elemente-Verfahrens. Das Koordinatensystem wird hierfür so gewählt, dass die Disklinationslinie entlang der z -Achse liegt. Der Querschnitt des Kerns liegt in der x - y -Ebene, welche wir mit 70×70 Punkten auflösen. Da die Simulationsbox entlang der z -Achse periodisch fortgesetzt wird, spielt die Auflösung in dieser Richtung keine Rolle. Auch hängt das Ergebnis nicht von der z -Koordinate ab, weshalb die Simulationen im Prinzip als zweidimensional angesehen werden können.

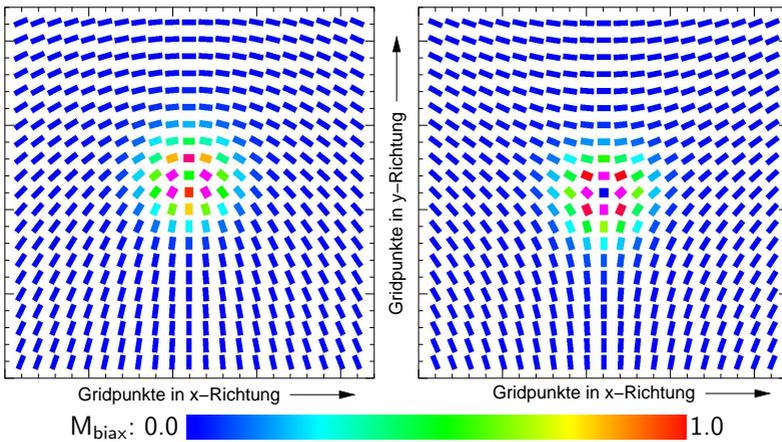


Abbildung 6.2: \mathbf{Q} -Tensor-Konfigurationen der beiden halbzahliggen Defektkerne. Links $s = +\frac{1}{2}$, rechts $s = -\frac{1}{2}$. Die Defektlinie steht in diesem Bild senkrecht auf der Blattebene, die durch die x - y -Ebene aufgespannt wird.

Zu Beginn der Energieminimierung stellen wir das \mathbf{Q} -Tensorfeld so ein, dass es dem analytischen Fernfeld [20] der Defekte entspricht. Die Direktororientierung wird dabei mit dem Eigenvektor zum größten Eigenwert des uniaxial vorgegebenen Ordnungsparameters identifiziert (vgl. Abschnitt 3.5). Auf den Rändern in x - bzw. y -Richtung wird der \mathbf{Q} -Tensor festgehalten. Die verwendeten Parameter entsprechen, soweit nicht anders angegeben, denen aus Anhang B.

Als charakteristische Länge wählen wir die Kantenlänge der kubischen

Simulationsbox $b = 160 \text{ nm} \approx 11,5 \xi_R$, woraus sich das Verhältnis der elastischen zur Volumenenergie als

$$\frac{\xi_R^2}{b^2} = 7,5 \cdot 10^{-3}$$

ergibt. Außer im Kern der Disklinationslinie selbst sollten Verzerrungen also nicht in der Lage sein, Biaxialität hervorzurufen.

Wie bereits in Kapitel 1.3 erwähnt, wird die Singularität des Direktorbildes durch biaxialen *escape* entfernt. Wir erhalten die in Abbildung 6.2 dargestellten Konfigurationen, wobei die Farbkodierung das Biaxialitätsmaß (1.4) visualisiert. Der Kern der Disklinationen ist uniaxial oblat. Er ist umgeben von einem Ring maximaler Biaxialität. Das Fernfeld ist uniaxial prolat.

Wir betrachten nun die Energiedichten der beiden Defektkerne. Abbildung 6.3 zeigt f_{ges} , f_{bulk} und f_{elast} für Schnitte durch den Defekt kern entlang der x -Richtung bei $y = b/2$.

Das Fernfeld zeigt das bereits aus dem vorangegangenen Kapitel bekannte Verhalten. Die Beträge der elastischen Energie sind um einen Faktor $b^2/\xi_R^2 \approx 133$ kleiner als die der Volumenenergie. Der Verlauf der Energien unterscheidet sich am Rand nicht wesentlich und wird durch f_{bulk} bestimmt, da die elastische Energie nahezu Null ist.

Im Kern hingegen ist das Verhalten anders: Der Betrag des Maximums der Gesamtenergie (blaue Kurven) von $s = +\frac{1}{2}$ ist ungefähr um einen Faktor 6,2 höher als desjenigen von $s = -\frac{1}{2}$. Schätzen wir den Kernradius anhand der Breite der Energiedichte ab, so erhalten wir

$$R_c \approx 10 \text{ nm}$$

für beide Disklinationskerne, was recht gut mit den Werten aus Abschnitt 4.1 übereinstimmt.

Verfolgen wir den Verlauf der Volumenenergie (rote Kurven) im Kern, so weicht dieser für $s = -\frac{1}{2}$ nur geringfügig von dem des $+\frac{1}{2}$ -Defektes ab. Die Ursache für die großen Unterschiede in der Gesamtenergie müssen also in der elastischen Energie liegen.

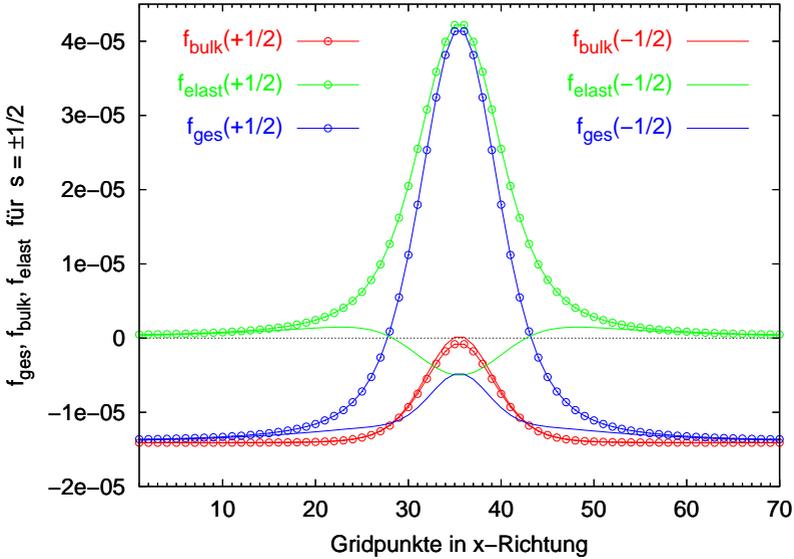


Abbildung 6.3: Gesamt-, Volumen- und elastische Energie des Defektkerns entlang eines Schnittes längs der x -Richtung bei $y = b/2$.

Am Rand der Simulationsbox ist der \mathbf{Q} -Tensor uniaxial; wir können ihn also mit dem Direktorbild beschreiben, in dem die elastische Energie nur quadratische Terme enthält³. Die Energie muss also positiv sein. Im Bereich des Kerns verliert das Direktorbild seine Gültigkeit. Die tensorielle Form (1.10) der elastischen Energie ist jedoch für beliebige biaxiale Tensoren zwar nach unten beschränkt, aber nicht mehr zwingend positiv, wie sich durch Einsetzen eines beliebigen spurlos-symmetrischen Tensors zeigen lässt.

Die elastische Energie des $+\frac{1}{2}$ -Defektkerns ist positiv und um ein Vielfaches größer als die Volumenenergie. Verzerrungen bestimmen also diesen Defektkern.

Für $s = -\frac{1}{2}$ finden wir am Ort des Kerns gerade ein Minimum der elastischen Energie, während das Fernfeld, wie oben gefordert, positive

³In allen Simulationen der vorliegenden Arbeit ist $k_{24} = 0$.

Energie besitzt. Der negativ halbzahlige Defektkern wird also zu gleichen Anteilen durch die elastische und die Volumenenergie bestimmt. Die Unterschiede der elastischen Energien werden sich insbesondere auf den Spannungstensor auswirken. Da die Eigenschaften der beiden Disklinationskerne nun bekannt sind, wollen wir einige Überlegungen zu der Strömung anstellen, der wir die Kerne der Defekte aussetzen werden.

6.3 Die homogene Strömung

Die in Abschnitt 6.2 vorgestellten Disklinationen sollen nun in ein Strömungsfeld gebracht werden. Um die Wirkung der Disklinationslinie möglichst gut von speziellen Eigenschaften der Strömung zu trennen, wählen wir die homogene Strömung. Unter ihr verstehen wir in dieser Arbeit eine Strömung, deren Geschwindigkeitsfeld überall gleich groß und gleich gerichtet ist. Dies hat den Vorteil, dass die Strömung frei von intrinsischen Geschwindigkeitsgradienten ist, wie sie z.B. in der Poiseuille-Strömung [16, 77] auftreten.

Die Reynoldszahl wählen wir immer aus dem unterkritischen Bereich, $Re \ll 1$. Damit stellen wir sicher, dass kein turbulentes Verhalten auftreten kann. Die im vorigen Abschnitt beobachteten Wirbel sind kein Ausdruck von Turbulenz, sondern vielmehr eine Folge der Kopplung an den Orientierungsfreiheitsgrad.

Abbildung 6.4 zeigt den experimentellen Aufbau. Wir führen unsere Simulationen in einer kubischen Box der Kantenlänge b durch, die mit der charakteristischen Länge in Gleichung (3.2) und (3.3) übereinstimmt. Die Strömung erfolgt in Richtung der positiven y -Achse. Alle Werte auf den Oberflächen bei $z = 0$ und $z = b$ (im Folgenden als Platten bezeichnet) werden festgehalten. Die beiden anderen Raumrichtungen werden offen fortgesetzt, d.h. Werte am Rand werden aus dem Volumen heraus in erster Ordnung extrapoliert. Periodische Ränder scheiden aus, da sie zu Unstetigkeiten im Direktorfeld führen.

Bei der Festlegung der Randbedingungen für die Strömung stehen wir vor dem Problem, dass das Strömungsfeld in der x - y -Ebene gerade das Ziel unserer Simulation ist, wir also am Rand keine Vorgaben machen können. Wir entscheiden uns deshalb dafür, die Geschwindigkeit an den Platten vorzugeben. Durch die Viskosität der Flüssigkeit wird sich die Geschwindigkeit von den Platten auf das Volumen übertragen. Wir

wählen in reduzierten Einheiten (vgl. Kapitel 3) $\mathbf{v}^0 = (0, 1, 0)^T$.

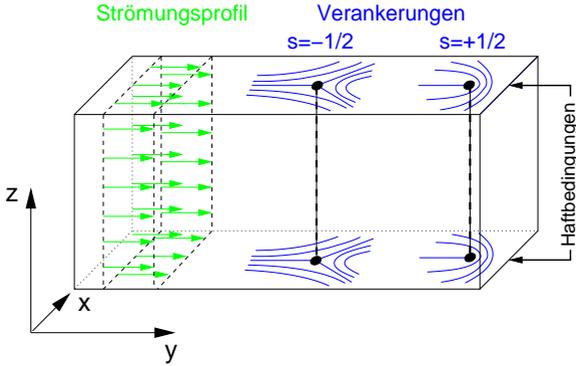


Abbildung 6.4: Das Setup für die homogene Strömung. Die in Wirklichkeit würfelförmige Simulationsbox wurde hier der Übersichtlichkeit halber in y -Richtung verzerrt, um die relative Orientierung der Disklinationslinien zur Strömung zu veranschaulichen.

Falls keine Disklinationen vorhanden sind ($\mathbf{Q} = \text{const.}$), bildet sich im Volumen die Geschwindigkeit $v_y = 1$ aus. Weder in der Impulsbilanz, noch in der Drehimpulsbilanz sind dann Gradienten vorhanden, die eine Kopplung induzieren könnten.

Falls eine Disklinationslinie im Volumen präsent ist, wird das Geschwindigkeitsfeld in deren Umgebung von der homogenen Strömung mit $v_y = 1$ abweichen. Wir werten deshalb die Schicht in der Mitte der Simulationsbox aus ($d = b/2$), bei der der Einfluss der festgehaltenen Ränder minimal sein sollte, den der Verlauf der untersuchten Größen in z -Richtung besitzt dort eine waagerechte Tangente. Dieses Vorgehen ist im Nachhinein gerechtfertigt, da die Abweichungen von der homogenen Strömung, die der Disklinationkern induziert, in der Tat sehr klein sind.

Die Gitterauflösung der dynamischen Simulationen beträgt $21 \times 21 \times 21$ Punkte. Damit liegen wir weit unter der im vorangegangenen Abschnitt verwendeten Auflösung von 70×70 in der Ebene. Dies hat numerische Ursachen. Bei der Integration der reduzierten Bewegungsgleichungen

(3.6)–(3.8) wird der Druck für jeden Zeitschritt so eingestellt, dass die Divergenzfreiheit des Geschwindigkeitsfeldes garantiert ist. Während die Integration der dynamischen Gleichungen immer dieselbe Rechenzeit in Anspruch nimmt, kann die Druckanpassung je nach Konfiguration sehr lange dauern. Der Rechenzeitbedarf eines Zeitschrittes wird also durch die Druckrelaxation bestimmt, die um so länger dauert, je höher die Auflösung des Gitters ist. Insbesondere beim Anströmen der Disklinationslinie treffen wir auf komplexe Konfigurationen. Die gewählte Auflösung ist also ein Ergebnis der Rechenzeitoptimierung. Um den Kern mit weniger Gitterpunkten weiterhin gut auflösen zu können, halbieren wir auch die Länge unserer Simulationsbox: $b = 80 \text{ nm} \approx 6,25 \xi_R$. Es zeigt sich, dass beim Anströmen der Disklinationslinie ein weiteres Problem auftritt. In dieser Arbeit werden die hydrodynamischen Gleichungen dazu verwendet, stationäre Zustände zu suchen, die sich unter vorgegebenen Randbedingungen einstellen. Die Anfangskonfiguration kann also beliebig weit von der Endkonfiguration abweichen. Im Fall der Disklinationslinien führt dies dazu, dass die Numerik nicht mehr konvergiert. Deshalb verwenden wir folgendes Näherungsverfahren:

Näherung für $\mu \approx \text{const.}$

Im Falle der homogenen Strömung sind alle Geschwindigkeitsgradienten zu Beginn Null. Damit würde sich die Drehimpulsbilanz (3.8) auf eine reine Rotationsdynamik

$$\frac{d}{dt} \mu_{\alpha\beta} = \frac{1}{St_2} H'_{\alpha\beta}$$

reduzieren. Da wir das Molekularfeld \mathbf{H} bereits verwendet haben, um die statischen Konfigurationen zu berechnen, wäre diese Gleichung identisch erfüllt. Im statischen Gleichgewicht gilt $\mathbf{H}' \parallel \boldsymbol{\mu}$. Der Ordnungsparameter wächst jedoch nicht weiter an, da \mathbf{H}' keine isotropen Anteile enthält (Spurlosigkeit).

Im stationären Zustand jedoch, welcher sich für lange Simulationszeiten einstellt, führen die flüssigkristallinen Anteile des Spannungstensors $\sigma_{\alpha\beta}^{\text{FLK}}$ dazu, dass sich Abweichungen von der homogenen Strömungsfront ergeben, also Gradienten induziert werden (vgl. Navier-Stokes-Gleichung (3.6)),

$$Re \frac{d}{dt} v'_\beta = -\partial_\beta p' + \frac{1}{2} \Delta v'_\beta + \frac{1}{St_1} \partial_\alpha \sigma_{\alpha\beta}^{\text{FLK}} .$$

Diese Gradienten koppeln nun wiederum in der Drehimpulsbilanz an den \mathbf{Q} -Tensor. Zur Lösung des Konvergenzproblems nehmen wir an, diese Geschwindigkeitsgradienten – und damit auch ihre Wirkung auf das \mathbf{Q} -Tensorfeld – seien klein. Wir können also

$$\mu_{\alpha\beta}(t) = \mu_{\alpha\beta}(0) = \text{const.} \implies \frac{\partial}{\partial t} \mu_{\alpha\beta} = 0 \quad (6.2)$$

setzen. Die Drehimpulsbilanz (3.8) verwenden wir stattdessen, um das Molekularfeld $H_{\alpha\beta}$ zu berechnen

$$\frac{1}{St_2} H'_{\alpha\beta} = \mu_{\alpha\beta,\gamma} v'_\gamma - \left[V_{\alpha\gamma}^{[a]'} \mu_{\gamma\beta} - \mu_{\alpha\gamma} V_{\gamma\beta}^{[a]'} \right] - \frac{\nu_3}{s} V_{\alpha\beta}^{[s]'} . \quad (6.3)$$

Auf diese Weise sind wir in der Lage, das Konvergenzproblem zu lösen und gleichzeitig die Kopplungen des Geschwindigkeitsfeldes an den \mathbf{Q} -Tensor indirekt im Spannungstensor zu berücksichtigen. Wir werden im folgenden Abschnitt sehen, dass diese Vorgehensweise gerechtfertigt ist.

6.4 Anströmen des Disklinationskerns

Wir haben nun alle Aspekte behandelt, die beim Anströmen der Defektlinien berücksichtigt werden müssen. Wie in Abschnitt 6.2 und 6.3 beschrieben, erzeugen wir nun die \mathbf{Q} -Tensorfelder der beiden Disklinationen und bauen sie in die Simulationsbox ein. Im gesamten Volumen geben wir \mathbf{v}^0 vor und starten anschließend die Zeitintegration. Das System entwickelt sich entsprechend der Gleichungen (3.6) und (6.3), bis es nach einiger Zeit einen stationären Zustand erreicht hat. Wie oben beschrieben, werten wir nur die Schicht in der x - y -Ebene bei $z = b/2$ aus.

Da wir mit offenen Rändern arbeiten, entspricht unsere Simulationsbox einem kleinen Ausschnitt der gesamten Konfiguration. Wir bezeichnen im Folgenden die weiter entfernte Umgebung der Disklination im Gegensatz zu dessen Kern als Fernfeld. Abbildung 6.5 zeigt die Komponente des Geschwindigkeitsfeldes in y -Richtung, $v_y(x, y)$. Ungefähr in der Mitte

der Defektkerne entspricht die Fließgeschwindigkeit dem an den Platten vorgegebenen Wert. Vor dem Kern fließt die Strömung schneller, dahinter langsamer.

Innerhalb des simulierten Bereichs betragen die Abweichungen von der vorgegebenen Geschwindigkeit etwa 0,08 und sind damit genau so groß wie die absoluten Geschwindigkeiten in x -Richtung⁴. Da wir nur einen kleinen Ausschnitt mit der Simulationsbox erfassen, entspricht $v_y(x, y)$ am Rand nicht der Geschwindigkeit in großer Entfernung zur Disklinationlinie.

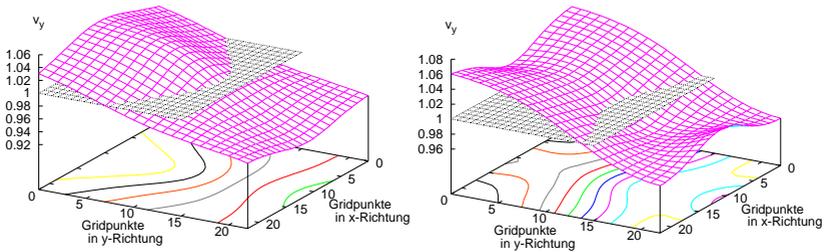


Abbildung 6.5: y -Komponente der Fließgeschwindigkeit. Die schwarze Fläche deutet die Lage der homogenen Strömung an ($v_y = 1,0$, $Re = 10^{-4}$). Links $s = +\frac{1}{2}$, rechts $s = -\frac{1}{2}$. Die Disklinationlinien stehen senkrecht auf der x - y -Ebene, die Mitte der Kerne liegt etwa bei $y = x = 11$ Gridpunkten.

Stromliniendarstellung

Die kleinen Abweichungen ($\mathbf{v} - \mathbf{v}^0$) von der homogenen Strömung sind in x - und y -Richtung von derselben Größenordnung. Um sie sichtbar zu machen, skalieren wir sie relativ zur Geschwindigkeit \mathbf{v}^0 mit einem Faktor $c = 3$,

$$\mathbf{v}^S = \mathbf{v}^0 + c(\mathbf{v} - \mathbf{v}^0) , \quad (6.4)$$

wobei \mathbf{v}^0 die Geschwindigkeit der homogenen Strömung ist. Für diese neue Geschwindigkeit zeichnen wir in Abbildung 6.6 die Stromlinien [52].

⁴Die Geschwindigkeitskomponente in z -Richtung liegt an der Grenze der numerischen Genauigkeit und kann daher vernachlässigt werden.

Sie sind die Integralkurven zu den Tangenten an das Geschwindigkeitsfeld.

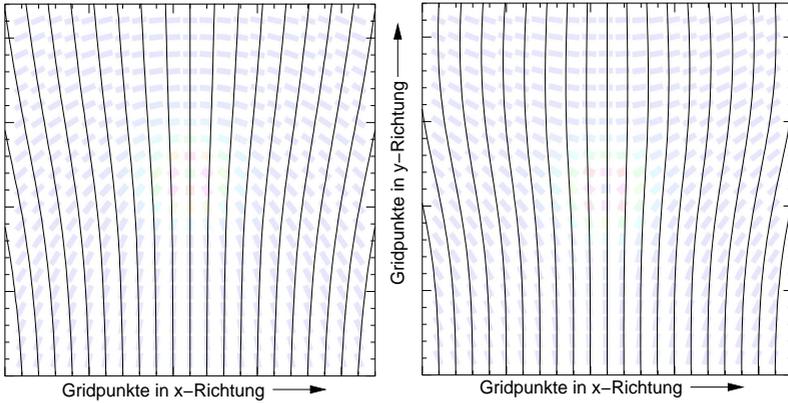


Abbildung 6.6: Stromlinien und \mathbf{Q} -Tensorkonfiguration der beiden halbzahligen Defektkerne ($Re = 10^{-4}$). Links $s = +\frac{1}{2}$, rechts $s = -\frac{1}{2}$. Dargestellt sind die Stromlinien für die skalierte Geschwindigkeit \mathbf{v}^S . Um die kleinen Änderungen gegenüber der homogenen Strömung sichtbar zu machen, werden sie dreifach überhöht dargestellt. Die Strömung erfolgt in positiver y -Richtung. Im Hintergrund sind die \mathbf{Q} -Tensorfelder aus Abbildung 6.2 eingeblendet.

Die Stromlinien des positiv-halbzahligen Defektes laufen zu beiden Seiten des Kerns nach außen. Zumindest innerhalb des Simulationsvolumens konvergieren sie nicht mehr.

Im Gegensatz dazu erinnert das Stromlinienbild des negativ-halbzahligen Defektes entfernt an dasjenige eines umströmten Zylinders. Die Strömung läuft auf Höhe des Kerns auseinander, um weiter hinten wieder enger zu werden. Die Aufweitung der Stromlinien ist jedoch nicht auf Höhe des Kerns am größten, sondern dahinter. Bei genauem Hinsehen fällt auf, dass bei $y = 0$ die Strömung nicht parallel zur y -Achse verläuft, sondern ebenfalls eine Verengung der Stromlinien stattfindet.

Im Gegensatz zum Zylinder scheinen die Defektkerne keine „harten“ Hindernisse darzustellen, wie aufgrund der Energieverläufe vermutet

werden könnte. Ihre Lage ist nicht unmittelbar aus den Stromlinien ersichtlich. Um den Einfluss auf die Strömung besser zu verstehen, ist es hilfreich, die Divergenz des Spannungstensors zu betrachten.

Die Divergenz des Spannungstensors

Abbildung 6.5 und 6.6 legen den Schluss nahe, dass hydrodynamisch zwischen Kern und Fernfeld unterschieden werden muss.

Im Fernfeld ist der Ordnungsparameter uniaxial. Verzerrungen, die als Gradienten in die hydrodynamischen Gleichungen eingehen, beruhen auf der räumlichen Variation des Direktors \mathbf{n} . Durch die Kopplung dieser Gradienten an das Geschwindigkeitsfeld können Richtungsänderungen induziert werden; die Strömung wird abgelenkt.

Im biaxialen Kern der Disklinationen dominieren Variationen der Eigenwerte die elastische Energie. Zwar sind auch Orientierungsänderungen vorhanden. Ihr Beitrag zu den Gradienten ist jedoch vernachlässigbar. Aus diesem Grund ist der Defektkern nicht in der Lage, die Strömung abzulenken.

In Abbildung 6.7 sind die Divergenzen des Spannungstensors als Vektorfeld dargestellt. Für beide Disklinationen zeigt die Divergenz vorwiegend in negativer y -Richtung, also entgegen der Strömung.

Um eine quantitative Analyse dieser Aussage zu erhalten, berechnen wir die Kraft F_β^{visk} , die pro Längenelement der Disklinationen auf die simulierte Schicht wirkt. Die Kraft auf ein Randelement mit dem Normalenvektor df_α erhalten wir, wenn wir den Normalenvektor mit dem Spannungstensor multiplizieren. Anstatt die Kraft auf den Rand des Flächenquerschnittes aufzusummieren, verwenden wir den auf Tensoren erweiterten Satz von Gauß,

$$F_\beta^{\text{visk}} = \frac{1}{L} \int_{\partial V} df_\alpha \sigma_{\alpha\beta} = \frac{1}{L} \int_V dV \partial_\alpha \sigma_{\alpha\beta} \quad , \quad (6.5)$$

der die Integration über die Oberfläche in ein Volumenintegral der Divergenz umwandelt.

Im Fall des umströmten Zylinders erhält man auf diese Weise die Reibungskraft, die den Zylinder in Strömungsrichtung mitzieht. Im Fall der Disklinationen ist die Kraft jedoch gerade gegen die Strömung gerichtet, weshalb wir sie als negative Reibungskraft bezeichnen.

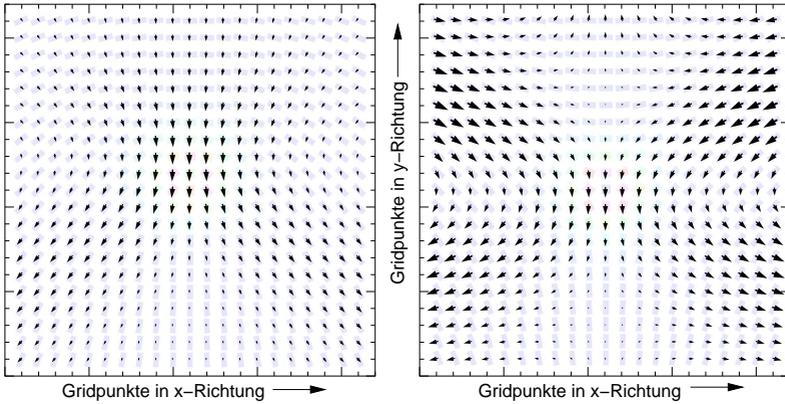


Abbildung 6.7: Divergenz $\partial_\alpha \sigma_{\alpha\beta}$ des Spannungstensors für den positiv-halbzahligen (links) und den negativ-halbzahligen Defekt (rechts). Am Ort des Kerns ist die Divergenz gegen die Strömung gerichtet, welche in positiver y -Richtung erfolgt. Die Pfeillängen sind auf den Betrag des größten Divergenzvektors normiert ($2,94 \cdot 10^{-5}$ in reskalierten Einheiten für beide Defekte).

Die Kräfte auf den Disklinationenkern sind nahezu gleich (der Unterschied beträgt ungefähr 3%). Offensichtlich führt eine Änderung der Eigenwerte (also der Biaxialität) lediglich zu einer Änderung des Geschwindigkeitsbetrages, nicht aber der Richtung.

Dies ist im Feld außerhalb der Kerne anders. Die Divergenz des Spannungstensors verläuft hier entlang zweier Halbkreise, deren Mittelpunkt sich jeweils am Rand ($x = 0$ und $x = 22$, $y = 11$) befindet. Beim positiv halbzahligen Defekt ist die Divergenz in der unteren Hälfte wesentlich stärker als oberhalb (Abbildung 6.7, links). Dies ist der Grund für die durchgehende Aufweitung der Stromlinien. Beim negativ halbzahligen Defekt sind die Divergenzen gleich groß (Abbildung 6.7, rechts), die Stromlinien werden aufgeweitet und hinter dem Kern wieder zusammengedrückt.

Berechnet man aus den simulierten Querschnitten der Defekte die Reibungskräfte, die pro Längeneinheit auf die Disklinationen wirken, so erhält man die in Tabelle 6.1 angegebenen Werte.

Tabelle 6.1: Strömungswiderstand der Disklinationslinien bei $Re = 10^{-4}$ ($v_y^0 = 50 \mu\text{m/ms}$). Reibungskräfte zeigen in positive y -Richtung. Angegeben sind die Kräfte bezogen auf ein Linienelement dL der Disklinationen.

	$s = +\frac{1}{2}$	$s = -\frac{1}{2}$
reduzierte Kraft pro Länge	-0,105	-0,070
Kraft pro Länge	-210 $\mu\text{N/m}$	-140 $\mu\text{N/m}$

In dem der Simulation zugänglichen Bereich von $Re = 10^{-2}$ bis $Re = 10^{-4}$ ergeben sich qualitativ gleiche Stromlinienbilder und Spannungstensordivergenzen. Die dabei ermittelte Reibungskraft hängt linear von der Reynoldszahl ab.

Für Reynoldszahlen kleiner als 10^{-4} wird sich der qualitative Verlauf des Spannungstensors in Kernnähe ändern. Wird die Geschwindigkeit schließlich Null, so bleibt allein der elastische Anteil des Spannungstensors übrig ($\partial_\alpha \sigma_{\alpha\beta}^{\text{elast}}$), der aufgrund der elastischen Verzerrungen des Flüssigkristalls stets vorhanden ist. Dieser elastische Anteil ist in Abbildung 6.8 dargestellt. Die Divergenz des Spannungstensors zeigt dann radialsymmetrisch nach außen, sodass der Defekt sich nicht von alleine in Bewegung setzen kann.

Bezug zur Defektannihilation

Zu Beginn dieses Kapitels haben wir die Annihilation zweier Disklinationslinien beschrieben. Um unsere Ergebnisse mit jenen von TOTH *et al.* vergleichen zu können, berechnen wir die Reynoldszahl für die Werte aus [14]⁵:

$$Re^{\text{Toth}} \approx 5 \cdot 10^{-7} \quad (6.6)$$

⁵Viskosität $\nu = 0,16 \frac{\text{Kg}}{\text{m s}}$; charakteristische Geschwindigkeit $v = 0,1 \cdot 10^{-3} \frac{\text{m}}{\text{s}}$; charakteristische Länge $2D = 0,8 \mu\text{m}$; die Dichte haben wir wie in unserer Arbeit gewählt.

Die Reynoldszahl ist also ungefähr um einen Faktor 200 kleiner als die von uns verwendete. Leider war uns der Bereich $Re < 10^{-4}$ aufgrund der Instabilität der Zeitintegration nicht zugänglich. Aus demselben Grund war es uns nicht möglich, die Simulationsbox zu vergrößern, sodass wir nur einen kleinen Ausschnitt der Kernumgebung simulieren konnten.

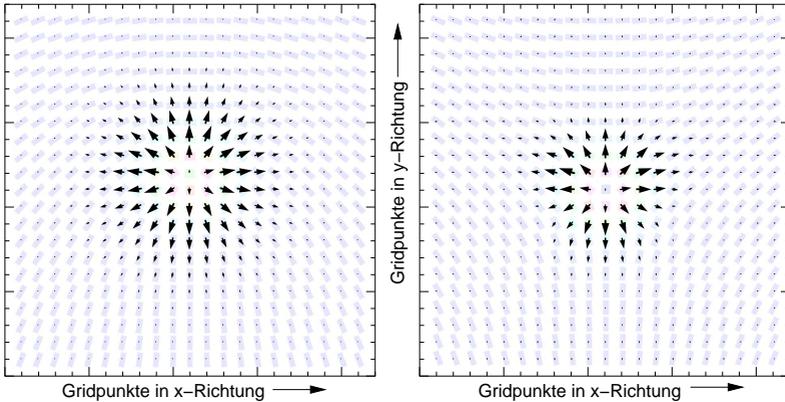


Abbildung 6.8: Die Divergenz $\partial_\alpha \sigma_{\alpha\beta}^{\text{elast}}$ des elastischen Anteils des Spannungstensors zeigt für den positiv-halbzahligem (links) radialsymmetrisch nach außen, im Falle des negativ-halbzahligem Defekt ist die trigonale Symmetrie des Defektes erkennbar (rechts). Der Kern selbst ist spannungsfrei.

Dennoch lassen sich einige Schlussfolgerungen aus den vorgestellten Simulationsergebnissen ziehen: Bei TOOTH *et al.* gehen die Verzerrungen im Ordnungsparameterfeld für große Abstände zu den Defekten gegen Null. Damit werden auch die Effekte, die auf den Kopplungen an diese Gradienten beruhen, immer kleiner. Die von uns gefundenen Verläufe für die Divergenz des Spannungstensors können sich also mit zunehmendem Abstand vom Kern noch verändern.

Die unterschiedlichen Reibungswiderstände könnten in diesem Fall für die verschiedenen Geschwindigkeiten der Defekte verantwortlich sein. TOOTH *et al.* haben für den $+\frac{1}{2}$ -Defekt eine doppelt so hohe Geschwindigkeit wie für den $-\frac{1}{2}$ -Defekt gefunden, dessen Geschwindigkeit in etwa

mit derjenigen für eine reine Rotationsdynamik übereinstimmt. Die von uns gefundenen negativen Reibungskräfte unterscheiden sich um einen Faktor $\frac{3}{2}$, wobei der negativ-halbzahlige Defekt ebenfalls die kleinere Kraft erfährt.

Die Entstehung von Wirbeln haben wir in unseren Simulationen nicht beobachtet. Vermutlich waren dazu die Anströmgeschwindigkeiten zu hoch. Aus diesem Grund verzichten wir auf einen tiefergehenden Vergleich mit den Ergebnissen von TOTH *et al.*

Schlussbemerkung

Die Stokes'sche Reibung von Körpern in viskosen Flüssigkeiten gehört zu den klassischen Experimenten in der Hydrodynamik. Wir haben in diesem Kapitel versucht, diese Idee auf die Reibung von Disklinationen in Flüssigkristallen zu übertragen. Dabei haben wir gesehen, dass die Kopplung der Geschwindigkeiten an den flüssigkristallinen Ordnungsparameter einen wesentlichen Einfluss ausübt. So wirken die Reibungskräfte auf die Kerne der Disklinationen entgegen der Strömungsrichtung. Zusätzlich werden Geschwindigkeiten quer zur Strömung induziert. Vom Betrag her sind die auftretenden Effekte bei unterkritischen Reynoldszahlen sehr klein, jedoch liegen die damit verbundenen Kräfte in der Größenordnung der anziehenden Kräfte, die bei der Annihilation von Defekten auftreten.

Zusammenfassung und Ausblick

In der vorliegenden Arbeit untersuchten wir die Dynamik von Disklinationen in anisotropen Fluiden. Hierbei richteten wir unser Augenmerk auf die Entstehung, Bewegung und Vernichtung der Defektlinien als Ganzes, klärten aber auch detailliert die Hydrodynamik von Defektkernen auf.

Anisotrope Fluide werden durch eine weitreichende Orientierungsordnung charakterisiert. Dieser Orientierungsfreiheitsgrad wird durch einen tensoriellen Ordnungsparameter, den \mathbf{Q} -Tensor, erfasst. Durch Entwicklung der freien Energie nach \mathbf{Q} erhält man die Volumenenergie, mit der Phasenübergänge beschrieben werden können. Durch die Einführung einer elastischen Gradientenenergie können Verzerrungen im Ordnungsfeld berücksichtigt werden. Diese sind eine Folge der von Außen aufgeprägten Randbedingungen oder aber auch von topologischen Defekten im Fluid, wie z.B. Disklinationen (Liniendefekten).

In der Hydrodynamik muss dem Ordnungsparameter mit einer zusätzlichen Gleichung Rechnung getragen werden. Wir stellten in dieser Arbeit deshalb einen vollständigen Satz hydrodynamischer Gleichungen vor. Das Ergebnis ist eine Navier-Stokes-Gleichung, in deren Spannungstensor elastische und viskose Anteile des Flüssigkristalls auftreten. Hinzu tritt eine Drehimpulsbilanz für \mathbf{Q} , in welcher die Gradienten des Geschwindigkeitsfeldes an den Ordnungsparameter koppeln.

Um dieses Gleichungssystem auf seine wesentlichen Eigenschaften zu reduzieren, führten wir dimensionslose Variablen ein. Wir sahen, dass außer der Reynoldszahl noch zwei weitere Größen auftreten, die das Verhältnis von viskoser zu elastischer Energie charakterisieren. Die erhaltenen Gleichungen implementierten wir numerisch.

Als erste Anwendung untersuchten wir die Multidomänenzelle, eine spezielle Abwandlung der klassischen TN-Zelle, welche die Blickwinkelabhängigkeit auf einfache Art verringert. Da die Geometrie der Anordnung sehr komplex ist, verzichteten wir auf die Kopplung an das Geschwindigkeitsfeld und implementierten für den Direktor eine Rotationsdynamik. Aufgrund spezieller Randbedingungen für den Direktor lassen sich in dieser Zelle Disklinationen mit Hilfe einer von außen angelegten elektrischen Spannung in Bewegung setzen und ihre Erzeugung und Vernichtung steuern.

Anschließend vollzogen wir den Übergang zum tensoriellen Ordnungs-

parameter. Um ein besseres Verständnis für die neu hinzugekommenen biaxialen Freiheitsgrade zu ermöglichen, beschäftigten wir uns mit dünnen Filmen, an deren Oberfläche wir den Flüssigkristall verankerten. Wir zeigten, dass die dadurch entstandene Helixstruktur bei hinreichend kleiner Filmdicke in einen Eigenwertaustausch übergeht.

Zum Schluss untersuchten wir die Hydrodynamik des tensoriellen Ordnungsparameterfeldes von halbzahligen Disklinationen. Hierzu setzten wir die Defektlinien einer homogenen Strömung aus. Die Kopplungen zwischen Geschwindigkeitsfeld und Ordnungsparameter führen zu Reibungskräften, die der Strömung entgegen gerichtet und für positiv- und negativ-halbzahlige Defektlinien unterschiedlich groß sind.

Ausblick

Die Lösung der hydrodynamischen Gleichungen für den tensoriellen Ordnungsparameter eröffnet eine Vielzahl von Perspektiven. So könnte die Dynamik der Annihilation von Disklinationlinien auf der Ebene des Kerns studiert werden.

Setzt man die Entwicklung der Volumenenergie bis zur sechsten Ordnung fort, so werden biaxiale Phasen auch ohne Verzerrungen möglich. Die Homotopiegruppe, welche deren Defektstärke beschreibt, ist die Quaternionengruppe und somit nicht abelsch. Dies führt zu topologischen Obstruktionen beim Kreuzen der Defektlinien, ein Prozess, der schon seit langem vorhergesagt, aber nie beobachtet wurde und mit dem vorliegendem Algorithmus verifiziert werden könnte.

Anhang

A Vollständige zeitliche Ableitung der freien Energie

Wir leiten die in Abschnitt 2.1 gegebene freie Energie Gl. (2.3) vollständig nach der Zeit ab, wobei wir nacheinander alle drei Summanden des folgenden Ausdrucks umformen.

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}F &= \frac{d}{dt} \int f \, d^3r \\ &= \frac{d}{dt} \int \left[\frac{1}{2}\rho|\mathbf{v}|^2 + f_0(\rho) + f_L(\mathbf{Q}, \nabla\mathbf{Q}) \right] d^3r = ? \quad (\text{A.1}) \end{aligned}$$

Der erste Summand (kinetische Energie)

Wir werten zunächst den ersten Summanden aus. Mit Hilfe der Kontinuitätsgleichung kann gezeigt werden, dass die totale Zeitableitung unter das Integral gezogen werden darf (Reynold'sches Transporttheorem):

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \int \frac{1}{2}\rho v_\beta v_\beta \, d^3r &= \int \rho v_\beta \frac{d}{dt} v_\beta \, d^3r \stackrel{(\text{A.2})}{=} \int (\partial_\alpha \sigma_{\alpha\beta}^{\text{ges}}) v_\beta \, d^3r \\ &\stackrel{\text{part. Int.}}{=} \int \partial_\alpha (\sigma_{\alpha\beta}^{\text{ges}} v_\beta) \, d^3r - \int \sigma_{\alpha\beta}^{\text{ges}} (\partial_\alpha v_\beta) \, d^3r \\ &= \int_\Sigma \sigma_{\alpha\beta}^{\text{ges}} v_\beta \, d\Sigma_\alpha - \int \sigma_{\alpha\beta}^{\text{ges}} \partial_\alpha v_\beta \, d^3r \quad . \end{aligned}$$

Hierbei haben wir die Navier-Stokes-Gleichung

$$\rho \frac{d}{dt} v_\beta = \partial_\alpha \sigma_{\alpha\beta}^{\text{ges}} \quad (\text{A.2})$$

verwendet und einmal partiell integriert. Divergenzbildung eines Tensors resultiert in dieser Arbeit in einem Vektor, dessen Komponenten die Vektordivergenz der Spalten, nicht der Zeilen des Tensors ist.

Der zweite Summand (isotrope Referenzenergie)

Der zweite Summand liefert (die Temperatur ist in dieser Arbeit als konstant gewählt)

$$\frac{d}{dt} \int f_0(T, \rho) d^3r = \int \frac{\partial f_0}{\partial \rho} \frac{d}{dt} \rho d^3r .$$

Um $\frac{\partial f_0}{\partial \rho}$ zu bestimmen, betrachten wir den hydrostatischen Druck in der Thermodynamik bei konstanter Temperatur,

$$p = -\frac{\partial F(T, V, N)}{\partial V} = -\frac{V}{N} \frac{\partial F(T, \frac{N}{V})}{\partial \frac{V}{N}} \stackrel{(\rho = \frac{N}{V})}{=} -\frac{1}{\rho} \frac{\partial f_0(T, \rho)}{\partial \rho^{-1}} .$$

Dabei haben wir $\frac{1}{N}$ aus der partiellen Ableitung vorgezogen und

$$F(T, \lambda V, \lambda N) = \frac{1}{\lambda} F(T, V, N)$$

mit $\lambda = \frac{1}{V}$ verwendet. Für die Ableitung nach ρ^{-1} schreiben wir

$$\frac{\partial}{\partial \rho^{-1}} = \frac{\partial \rho}{\partial \rho^{-1}} \frac{\partial}{\partial \rho} = -(\rho^{-1})^{-2} \frac{\partial}{\partial \rho} = -\rho^2 \frac{\partial}{\partial \rho}$$

und weiter

$$p = \rho \frac{\partial f_0}{\partial \rho} \quad \Longrightarrow \quad \frac{\partial f_0}{\partial \rho} = \frac{p}{\rho} .$$

Um die vollständige Zeitableitung von ρ zu finden, verwenden wir die leicht umgeformte Kontinuitätsgleichung¹,

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \partial_\beta (v_\beta \rho) = 0 \quad \Longrightarrow \quad \frac{d}{dt} \rho + \rho \partial_\beta v_\beta = 0 .$$

Für den zweiten Summanden erhalten wir demnach den Ausdruck

$$\frac{d}{dt} \int f_0(\rho) d^3r = - \int p \delta_{\alpha\beta} \partial_\alpha v_\beta d^3r . \quad (\text{A.3})$$

¹ $\partial_\beta (v_\beta \rho) = v_\beta \partial_\beta \rho + \rho \partial_\beta v_\beta$

Der dritte Summand (nematische Energie)

Schließlich werten wir noch den dritten Summanden aus,

$$\frac{d}{dt} \int f_L(Q_{\mu\nu}, Q_{\mu\nu,\alpha}) d^3r = \int \left[\frac{\partial f_L}{\partial Q_{\mu\nu}} \frac{d}{dt} Q_{\mu\nu} + \frac{\partial f_L}{\partial Q_{\mu\nu,\alpha}} \frac{d}{dt} Q_{\mu\nu,\alpha} \right] d^3r .$$

Um die vollständige Zeitableitung $\frac{d}{dt}$ mit der Gradientenbildung ∂_α zu vertauschen, betrachten wir

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} Q_{\mu\nu,\alpha} &= \frac{\partial}{\partial t} Q_{\mu\nu,\alpha} + v_\beta \partial_\beta Q_{\mu\nu,\alpha} \\ &= \partial_\alpha \frac{\partial}{\partial t} Q_{\mu\nu} + \partial_\alpha (v_\beta \partial_\beta Q_{\mu\nu}) - (\partial_\alpha v_\beta) (\partial_\beta Q_{\mu\nu}) \\ &= \partial_\alpha \frac{d}{dt} Q_{\mu\nu} - (\partial_\alpha v_\beta) (\partial_\beta Q_{\mu\nu}) . \end{aligned}$$

Wir erhalten als Zwischenergebnis

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \int f_L(Q_{\mu\nu}, Q_{\mu\nu,\alpha}) d^3r &= \\ &= \int d^3r \left[\frac{\partial f_L}{\partial Q_{\mu\nu}} \frac{d}{dt} Q_{\mu\nu} + \underbrace{\frac{\partial f_L}{\partial Q_{\mu\nu,\alpha}} \partial_\alpha \frac{d}{dt} Q_{\mu\nu}}_{(1)} - \frac{\partial f_L}{\partial Q_{\mu\nu,\alpha}} (\partial_\alpha v_\beta) (\partial_\beta Q_{\mu\nu}) \right] . \end{aligned}$$

Nun führen wir eine partielle Integration für (1) aus

$$\begin{aligned} (1) : \int \frac{\partial f_L}{\partial Q_{\mu\nu,\alpha}} \partial_\alpha \frac{d}{dt} Q_{\mu\nu} d^3r &= \int \partial_\alpha \left(\frac{\partial f_L}{\partial Q_{\mu\nu,\alpha}} \frac{d}{dt} Q_{\mu\nu} \right) d^3r \\ &\quad - \int \left(\partial_\alpha \frac{\partial f_L}{\partial Q_{\mu\nu,\alpha}} \right) \frac{d}{dt} Q_{\mu\nu} d^3r . \end{aligned}$$

Das Ergebnis der partiellen Integration setzen wir oben ein und stellen die Terme so um, dass wir das Molekularfeld $H_{\mu\nu}$ und den elastischen Anteil des Spannungstensors $\sigma_{\alpha\beta}^{\text{elast}}$ identifizieren können

$$\begin{aligned}
\frac{d}{dt} \int f_L(Q_{\mu\nu}, Q_{\mu\nu,\alpha}) d^3r = & \\
\int \underbrace{\left[\frac{\partial f_L}{\partial Q_{\mu\nu}} - \partial_\alpha \frac{\partial f_L}{\partial Q_{\mu\nu,\alpha}} \right]}_{-H_{\mu\nu} = \frac{\delta f_L}{\delta Q_{\mu\nu}}} \frac{d}{dt} Q_{\mu\nu} d^3r - \int \underbrace{\left[\frac{\partial f_L}{\partial Q_{\mu\nu,\alpha}} (\partial_\beta Q_{\mu\nu}) \right]}_{-\sigma_{\alpha\beta}^{\text{elast}} = -\pi_{\alpha\mu\nu} (\partial_\beta Q_{\mu\nu})} (\partial_\alpha v_\beta) d^3r & \\
+ \int \partial_\alpha \left(\frac{\partial f_L}{\partial Q_{\mu\nu,\alpha}} \frac{d}{dt} Q_{\mu\nu} \right) d^3r . &
\end{aligned}$$

Schließlich läßt sich das Integral über die Divergenz in ein Oberflächenintegral umwandeln,

$$\begin{aligned}
\frac{d}{dt} \int f_L(Q_{\mu\nu}, Q_{\mu\nu,\alpha}) d^3r = \int \left[-H_{\mu\nu} \frac{d}{dt} Q_{\mu\nu} + \sigma_{\alpha\beta}^{\text{elast}} (\partial_\alpha v_\beta) \right] d^3r \\
+ \int_\Sigma \left(\pi_{\alpha\mu\nu} \frac{d}{dt} Q_{\mu\nu} \right) d\Sigma_\alpha . \quad (\text{A.4})
\end{aligned}$$

Das Endergebnis

Setzen wir die vollständigen zeitlichen Ableitungen der drei Summanden zusammen, so erhalten wir als Endergebnis

$$\begin{aligned}
\frac{d}{dt} F = \int \left[(\sigma_{\alpha\beta}^{\text{elast}} - p\delta_{\alpha\beta} - \sigma_{\alpha\beta}^{\text{ges}}) \partial_\alpha v_\beta - H_{\alpha\beta} \frac{d}{dt} Q_{\alpha\beta} \right] d^3r \\
- \int_\Sigma \pi_{\gamma\alpha\beta} \frac{d}{dt} Q_{\alpha\beta} d\Sigma_\gamma + \int_\Sigma \sigma_{\alpha\beta}^{\text{ges}} v_\beta d\Sigma_\alpha . \quad (\text{A.5})
\end{aligned}$$

Die Oberflächenintegrale gehen für ein unendlich großes Volumen gegen Null. An festgehaltenen Rändern liefern sie nur einen konstanten Beitrag zur freien Energie. Wir vernachlässigen sie deshalb in dieser Arbeit.

B Der Standardparametersatz

In den Kapiteln 5 und 6 werden nur diejenigen Werte angegeben, die für die spezielle Untersuchung variiert wurden. Damit nicht jedes Mal alle Parameter angegeben werden müssen, stellen wir hier einen vollständigen Satz vor. Da kein kompletter Satz an Größen für einen bestimmten Flüssigkristall vorliegt, greifen wir auf verschiedene Quellen zurück.

Die elastischen Konstanten entnehmen wir [68]. Die in der Landau-Energie enthaltenen Konstanten β und γ treten in Kombinationen auch in den Reskalierungen auf. Wir verwenden die Werte aus [78]. Die Simulationstemperatur ist $t = -1$, außerdem ist $k_{22} = 0$ in allen Simulationen.

Energiedichte

$$k_{11} = 12,4 \cdot 10^{-12} \text{ N} \quad k_{22} = 6,5 \cdot 10^{-12} \text{ N} \quad k_{33} = 19,9 \cdot 10^{-12} \text{ N}$$

$$\beta = 4,7 \cdot 10^5 \frac{\text{J}}{\text{m}^3} \quad s = \frac{\beta}{\sqrt{6}\gamma} = 0,24 \quad \frac{12\gamma}{\beta^2} = 4,29 \cdot 10^{-5}$$

$$\gamma = 7,9 \cdot 10^5 \frac{\text{J}}{\text{m}^3} \quad \frac{\beta^4}{36\gamma^3} = 2749 \quad \frac{\beta}{\gamma} = 0,6$$

$$\implies c_1 = \frac{1}{6} (3k_{22} - k_{11} + k_{33}) = 4,5 \cdot 10^{-12} \text{ N}$$

$$\implies \xi_R = \sqrt{\frac{12\gamma}{\beta^2}} c_1 = 1,39 \cdot 10^{-8} \text{ m}$$

Hydrodynamik

Für die Hydrodynamik wählen wir die Dichte $\rho = 1000 \frac{\text{Kg}}{\text{m}^3}$, was ungefähr der Größenordnung von Flüssigkristallen entspricht [79]. Die charakteristische Geschwindigkeit und die Reskalierung der Zeit ergibt sich dann aus der Angabe der Reynoldszahl. Die Viskositäten entsprechen in etwa denjenigen von 5CB.

$$\begin{aligned} b &= 10 \xi_R & \nu_1 &= \nu_2 = 0,04 \frac{\text{Kg}}{\text{m s}} & \nu_3 &= 1 \\ \frac{\nu_3}{s} &= 4,17 & \frac{b^2}{\xi_R^2} &= 100 & \rho &= 1000 \frac{\text{Kg}}{\text{m}^3} \\ v_0 &= 2,88 & \frac{b}{v_0} &= 4,8 \cdot 10^{-8} & p_0 &= 8,2 \cdot 10^5 \end{aligned}$$

Alle weiteren Werte hängen nun von der Reynoldszahl ab. Mittels

$$\tilde{v} = \frac{\nu_1}{b\rho} \tag{B.6}$$

ist die charakteristische Geschwindigkeit des Systems festgelegt. Diese wird verwendet, um die Geschwindigkeiten zu reskalieren. Bei der Vorgabe von Geschwindigkeitsprofilen wird als nun die Geschwindigkeit $v' = 1$ gesetzt. Aus der Skalierung der freien Energie ergibt sich $f = \tilde{f} f' = \frac{\beta^4}{36\gamma^3} f'$ und $s = \frac{\beta}{\sqrt{6\gamma}}$. Die Stelzerzahl St_1 und die Starkzahl St_2 lassen sich also in Abhängigkeit von der Reynoldszahl und der Viskosität ν_2 angeben².

$$St_1 = \frac{\nu_2 \tilde{v}}{b \tilde{f}} = \frac{\nu_1 \nu_2}{b^2 \rho f} Re \quad St_2 = \frac{\nu_2 \tilde{v}}{b \tilde{f}} s^2 = St_1 s^2$$

Der einzige noch verbleibende Parameter ist der kinetische Koeffizient ν_3 . Das Gleichungssystem wird also in der gegebenen Form bestimmt durch drei Parameter: Re , ν_2 und ν_3 bzw. durch

$$Re = 0,01 \quad , \quad St_1 = 3,01 \cdot 10^2 \quad , \quad St_2 = 1,78 \cdot 10^1 \quad .$$

Die folgenden Grössen geben wir der Übersichtlichkeit halber auch noch an

$$\Delta f = 2,8 \cdot 10^3 \quad , \quad \frac{1}{St_1} = 3,3 \cdot 10^{-3} \quad , \quad \frac{1}{St_2} = 5,6 \cdot 10^{-2} \quad .$$

Elektrisches Potential

In der Gleichung für die elektrische Spannung benötigen wir

$$\epsilon_{||} = 8,03 \quad , \quad \epsilon_{\perp} = 3,59 \quad , \quad \tilde{\phi} = 0,778 \quad .$$

²Eigentlich kann statt ν_2 auch direkt St_1 variiert werden. Wir verzichten jedoch auf diese Vorgehensweise, um die Zusammenhänge zwischen den reskalierten Werten nicht zu verlieren.

C Visualisierung

Automatisierte Suche nach Defekten

Ist die Direktorfeldkonfiguration einmal bekannt, so können die Defektlinien mittels automatisierter Burgersumläufe herausprepariert werden. Um einen Liniendefekt an einem bestimmten Punkt im Gitter aufzuspüren, sucht man die nächsten Nachbarn dieses Gitterpunktes auf und konstruiert einen Schleifenumlauf. An jedem Nachbarpunkt werden die Direktoren so orientiert, dass sie einen Winkel kleiner als 90° zum vorhergehenden einnehmen. Wieder am Ausgangspunkt angekommen, vergleichen wir die Orientierung des ersten Direktors mit dem letzten. Ein Liniendefekt wurde gefunden, falls der eingeschlossene Winkel größer als 90° ist. Sicherheitshalber wird der Umlauf auf die nächste Schicht der Nachbarn ausgeweitet, falls einer der Winkel während eines Umlaufs nahe bei 90° liegt.

Um eine dreidimensionale Ansicht der Lage der Disklinationen zu erhalten, verwenden wir die Virtual Reality Modeling Language (VRML, [80]). Jede im Gitter gefundene Defektposition wird auf eine kleine Kugel abgebildet, alle Kugeln zusammen ergeben das Bild der Disklinationlinie.

Transmissionsberechnung

Zur Berechnung verwenden wir die 2×2 Jones-Matrix Methode [81]. Das einfallende Licht ist bei $z = d$ längs der y -Achse polarisiert und wird nach dem Durchgang durch die Zelle bei $z = 0$ von einem Polarisator längs y analysiert. Die remanente Intensität wird auf Graustufen abgebildet: Maximale Transmission entspricht der Farbe weiß und minimale Transmission der Farbe schwarz. Jeder Grauwert wird einem Gitterpunkt in der x - y -Ebene zugeordnet, man erhält das Transmissionsbild der Direktorfeldkonfiguration.

Die Berechnungen wurden mit monochromatischem Licht der Wellenlänge $\lambda = 544 \text{ nm}$ durchgeführt, die Brechungsindizes parallel und senkrecht zum einfallenden Licht wurden zu $n_{\perp} = 1,489$ und $n_{\parallel} = 1,762$ gewählt.

Visualisierung von Tensorfeldern

Am besten lassen sich 3×3 Tensoren visualisieren, wenn man den Tensor hauptachsentransformiert. Die berechneten Eigenwerte verwendet man

dann, um die Kantenlängen eines Einheitswürfels zu skalieren (anders gesagt, zeichnen wir einen Quader, dessen Kantenlängen gerade dem Betrag der Eigenwerte entsprechen).

Die ebenfalls berechneten Hauptachsen des Tensors geben uns die gewünschte Lage im Raum an, wir müssen also den Quader noch drehen. Da im Falle des \mathbf{Q} -Tensors negative Eigenwerte auftreten können, addieren wir vor der Visualisierung einen Offset.

Nun wird der \mathbf{Q} -Tensor noch an seine Position im Gitter verschoben. Seine Oberfläche kann eingefärbt werden, um den Wert einer skalaren Größe an dieser Position auf dem Gitter zu kodieren.

Wir haben zur Visualisierung zwei verschiedene Techniken verwendet: Zum einen wiederum die Virtual Reality Modeling Language (VRML, [80]), die eine interaktive Visualisierung ermöglicht, zum anderen haben wir die Konfigurationen mit POV-Ray [82] gerendert, um sie mit hoher Auflösung abdrucken zu können.

Literaturverzeichnis

- [1] K. MAKI und P. KUMAR. Magnetic solitons in superfluid ^3He . *Phys. Rev. B*, **14** (1): 118, 1976.
- [2] V. P. MINEYEV. Planar and linear solitons in superfluid ^3He . *Phys. Rev. B.*, **18**, 1978.
- [3] Y. DUAN, H. ZHANG, und S. LI. Topological structure of the london equation. *Phys. Rev. B*, **58** (1): 125, 1998.
- [4] J. BERGER und J. RUBINSTEIN. Formation of topological defects in thin superconducting rings. *Philos. Trans. R. Soc. London, Ser. A*, **355** (1731): 1969, 1997.
- [5] H.-R. TREBIN. Defects in liquid crystals and cosmology. *Liq. Cryst.*, **24** (1): 127, 1998.
- [6] R. BASU und A. VILENKIN. Evolution of topological defects during inflation. *Phys. Rev. D*, **50** (12): 7150, 1994.
- [7] A. VILENKIN und E. P. S. SHELLARD. *Cosmic Strings and other Topological Defects*. Cambridge University Press, 1994.
- [8] I. CHUANG, R. DURRER, N. TUROK, und B. YURKE. Cosmology in the laboratory: Defect dynamics in liquid crystals. *Science*, **251**: 1336, March 1991.
- [9] H.-R. TREBIN. The topology of non-uniform media in condensed matter physics. *Adv. Phys.*, **31** (3): 195, 1982.
- [10] N. D. MERMIN. The topological theory of defects in ordered media. *Rev. Mod. Phys.*, **51** (3): 591, 1979.
- [11] A.-CH. DAVIS und R. BRANDENBERGER. *Formation and Interactions of Topological Defects*, Band 349 von *NATO ASI Series B: Physics*. New York: Plenum, 1995.
- [12] M. ZAPOTOCKY, P. M. GOLDBART, und N. GOLDENFELD. Kinetics of phase ordering in uniaxial and biaxial nematic films. *Phys. Rev. E*, **51** (2): 1216, 1995.
- [13] J. ENGLERT, L. LONGA, H. STARK, und H.-R. TREBIN. Fluctuations dominate the phase diagram of chiral-nematic liquid crystals. *Phys. Rev. Lett.*, **81** (7): 1457, 1998.

-
- [14] G. TOTH, C. DENNISTON, und J. M. YEOMANS. Hydrodynamics of topological defects in nematic liquid crystals. *Phys. Rev. Lett.*, **88** (10): 105504, 2002.
- [15] C. DENNISTON, E. ORLANDINI, und J. M. YEOMANS. Lattice boltzmann simulations of liquid crystal hydrodynamics. *Phys. Rev. E*, **63**: 056702, 2001.
- [16] C. DENNISTON, E. ORLANDINI, und J. M. YEOMANS. Simulations of liquid crystals in poiseuille flow. *Comp. Theo. Pol. Sc.*, **11**: 389, 2001.
- [17] C. DENNISTON, E. ORLANDINI, und J. M. YEOMANS. Simulations of liquid crystal hydrodynamics in the isotropic and nematic phase. *Europhys. Lett.*, **52** (4): 481, 2000.
- [18] C. DENNISTON, E. ORLANDINI, und J. M. YEOMANS. Phase ordering in nematic liquid crystals. *Phys. Rev. E*, **64**: 201701, 2001.
- [19] J. I. FUKUDA. Effect of hydrodynamic flow on kinetics of nematic-isotropic transition in liquid crystals. *Eur. Phys. J. B*, **1**: 173, 1998.
- [20] P. G. DE GENNES. Short range order effects in the isotropic phase of nematics and cholesterics. *Mol. Cryst. Liq. Cryst.*, **12**: 193, 1971.
- [21] FRIEDRICH REINITZER. Beiträge zur Kenntniss [sic!] des Cholesterins. *Monatshefte Chemie*, **9**: 421, 1888.
- [22] O. D. LAVRETOVICH. <http://www.lci.kent.edu/defect.html>.
- [23] E. FISCHER und P. T. CALLAGHAN. Shear banding and the isotropic-to-nematic transition in wormlike micelles. *Phys. Rev. E*, **64** (1): 011501, 2001.
- [24] P. G. DE GENNES und J. PROST. *The Physics of Liquid Crystals*, Band 83 von *International Series of Monographs on Physics*. Oxford Science Publications, Oxford, zweite Auflage, 1993.
- [25] S. CHANDRASEKHAR. *Liquid Crystals*. Cambridge University Press, Cambridge, 1977.

- [26] M. J. STEPHEN und J. P. STRALEY. Physics of liquid crystals. *Rev. Mod. Phys.*, **46** (4): 617, 1974.
- [27] L. LONGA und H.-R. TREBIN. Spontaneous polarization in chiral biaxial liquid crystals. *Phys. Rev. A*, **42** (6): 3453, 1990.
- [28] P. KAISER, W. WIESE, und S. HESS. Stability and instability of an uniaxial alignment against biaxial distortions in the isotropic and nematic phases of liquid crystals. *J. Non-Equilib. Thermodyn.*, **17** (2): 153, 1992.
- [29] L. LONGA und H. R. TREBIN. Structure of the elastic free energy for chiral nematic liquid crystals. *Phys. Rev. A*, **39** (4): 2160, 1989.
- [30] L. D. LANDAU. On the theory of phase transitions. In D. ter Haar, Herausgeber, *Collected papers*, Seiten 193–216. Pergamon Press, 1965.
- [31] M. REICHENSTEIN, T. SEITZ, und H.-R. TREBIN. Numerical simulations of three dimensional liquid crystal cells. *Mol. Cryst. Liq. Cryst.*, **330**: 1793, 1999.
- [32] WERNER FUNK. *Einfluß der Oberfläche auf die statischen, dynamischen und optischen Eigenschaften flüssigkristalliner dünner Schichten*. Doktorarbeit, Institut für Theoretische und Angewandte Physik, Universität Stuttgart, 1991.
- [33] L. LONGA, D. MONSELESAN, und H. R. TREBIN. An extension of the Landau–Ginzburg–de Gennes theory for liquid crystals. *Liq. Cryst.*, **2** (6): 769, 1987.
- [34] F. C. FRANK. I. Liquid crystals: On the theory of liquid crystals. *Discuss. Faraday Soc.*, **25**: 19, 1958.
- [35] C. W. OSEEN. The theory of liquid crystals. *Trans. Faraday Soc.*, **29**: 883, 1933.
- [36] H. STARK. Director field configurations around a spherical particle in a nematic liquid crystal. *Eur. Phys. J. B*, **10**: 311, 1999.
- [37] H. STARK. Physics of colloidal dispersions in nematic liquid crystals. *Phys. Rep.*, **351** (6): 387, 2001.

-
- [38] D. DEMUS und L. RICHTER. *Textures of Liquid Crystals*. Verlag Chemie, 1978.
- [39] E. PENZENSTADLER und H.-R. TREBIN. Fine structure of point defects and soliton decay in nematic liquid crystals. *J. Phys. France*, **50**: 1027, 1989.
- [40] O. PARODI. Stress tensor for a nematic liquid crystal. *J. Phys. (Paris)*, **31**: 581, 1970.
- [41] G. VERTOGEN und W. H. DE JEU. *Thermotropic Liquid Crystals, Fundamentals*. Springer-Verlag, 1988.
- [42] P. OLMSTED und P. GOLDBART. Theory of the nonequilibrium phase transition for nematic liquid crystals under shear flow. *Phys. Rev. A*, **41** (8): 4578, 1990.
- [43] A. N. BERIS (B. J. EDWARDS). *Thermodynamics of Flowing Systems*. Oxford Science Publications, 1994.
- [44] E. BECKER und W. BÜRGER. *Kontinuumsmechanik*. B.G. Teubner, Stuttgart, 1975.
- [45] D. D. JOSEPH. *Fluid dynamics of viscoelastic liquids*, Band 83 von *Applied mathematical sciences*. Springer, 1990.
- [46] R. M. HORNREICH. Landau theory of the isotropic-nematic critical point theory of icosahedral liquid crystal structures. *Phys. Lett.*, **109**: 232, 1989.
- [47] W. H. PRESS. *Numerical Recipes in C: The Art of Scientific Computing*. Academic Press, Cambridge, zweite Auflage, 1992.
- [48] HOLGER STARK. *Hydrodynamik und Lichtstreuung in den flüssig-kristallinen kubischen Blauen Phasen*. Verlag Dr. C. Shaker, Aachen, 1994.
- [49] E. C. GARTLAND und S. MKADDEM. Fine structure of defects in radial nematic droplets. *Phys. Rev. E*, **62** (5): 6694, 2000.
- [50] B. J. BERNE und J. G. GAY. Modification of the overlap potential to mimic a linear site-site potential. *J. Chem. Phys.*, **74** (6): 3316, 1981.

-
- [51] JOACHIM STELZER. *Molekulardynamische Studien von Oberflächeneffekten nematischer Flüssigkristalle*. Doktorarbeit, Institut für Theoretische und Angewandte Physik, Universität Stuttgart, 1995.
- [52] M. GRIEBEL, T. DORNSEIFER, und T. NEUNHOEFFER. *Numerische Simulation in der Strömungsmechanik*. Vieweg, 1995.
- [53] M. SCHADT und W. HELFRICH. Voltage-dependent optical activity of a nematic liquid crystal. *Appl. Phys. Lett.*, **18**: 127, 1971.
- [54] M. REICHENSTEIN, H. STARK, J. STELZER, und H.-R. TREBIN. Motion, creation and annihilation of disclinations in multi-domain structured nematic liquid crystal cells. *Phys. Rev. E*, **65** (1): 117091, 2002.
- [55] M. OH-E und K. KONDO. Electro-optical characteristics and switching behavior of the in-plane switching mode. *Appl. Phys. Lett.*, **67** (26): 3895, 1995.
- [56] M. SCHADT, H. SEIBERLE, und A. SCHUSTER. Optical patterning of multi-domain liquid-crystal displays with wide viewing angles. *Nature*, **318**: 212, 1996.
- [57] J. CHEN, P. J. BOS, D. L. JOHNSON, J. R. KELLY, N. KIM, und J. CROW. Four-domain twisted nematic liquid crystal display fabricated by two alignment layers with low and high pretilt angles. *Jpn. J. Appl. Phys.*, **35**, 1996.
- [58] P. E. CLADIS, W. VAN SAARLOOS, P. L. FINN, und A. R. KORTAN. Dynamics of line defects in nematic liquid crystals. *Phys. Rev. Lett.*, **58** (3): 222, 1987.
- [59] G. RYSKIN und M. KREMENETSKY. Drag force on a line defect moving through an otherwise undisturbed field: Disclination line in a nematic liquid crystal. *Phys. Rev. Lett.*, **67** (12): 1574, 1991.
- [60] K. MINOURA, Y. KIMURA, K. ITO, R. HAYAKAWA, und T. MIURA. Annihilation of a wedge disclination pair in a hybrid aligned nematic cell. *Phys. Rev. E*, **58** (1): 643, 1998.

- [61] E. MORO und G. LYTHE. Dynamics of defect formation. *Phys. Rev. E*, **59** (2): R1303, 1999.
- [62] V. V. LEBEDEV. Intermittency in dynamics of two-dimensional vortexlike defects. *Phys. Rev. E*, **62** (1): 1002, 2000.
- [63] J. CHEN, P. J. BOS, D. R. BRYANT, D. L. JOHNSON, S. H. KAMAL, und J. R. KELLY. Simple four-domain twisted nematic liquid crystal display. *Appl. Phys. Lett.*, **67** (4): 1990, 1995.
- [64] J. LI, E. S. LEE, H. VITHANA, und P. J. BOS. Super-twisted-nematic liquid crystal displays with multidomain structures. *Jpn. J. Appl. Phys.*, **35** (2): 1446, 1996.
- [65] M. KLÉMAN. *Points, Lines and Walls: In liquid crystals, magnetic systems, and various ordered media*. John Wiley & Sons, New York, 1983.
- [66] M. J. PRESS und A. S. ARROTT. Elastic energies and director fields in liquid crystal droplets, I. Cylindrical symmetry. *J. Phys. (Paris) Coll. C1*, **36** (3): 177, 1975.
- [67] O. D. LAVRENTOVICH und YU.A. NASTISHIN. Defects in degenerate hybrid aligned nematic liquid crystals. *Europhys. Lett.*, **12** (2): 135, 1990.
- [68] MARTIN SCHADT, KLAUS SCHMITT, VLADIMIR KOZINKOV, und VLADIMIR CHIGRINOV. Surface-induced parallel alignment of liquid crystals by linearly polymerized photopolymers. *Jpn. J. Appl. Phys., Pt. 1*, **31**: 2155, 1992.
- [69] J. CHEN, J. LI, D. L. JOHNSON, und P. J. BOS. Investigation of domain instability in the four domain twisted nematic configurations. *Mol. Cryst. Liq. Cryst.*, **302**: 151, 1997.
- [70] J. STELZER, R. HIRNING, und H.-R. TREBIN. Influence of surface anchoring and viscosity upon the switching behavior of twisted nematic cells. *J. Appl. Phys.*, **74** (10): 6046, 1993.
- [71] C. DENNISTON. Disclination dynamics in nematic liquid crystals. *Phys. Rev. B*, **54** (9): 6272, 1996.

- [72] VRIES DE. Rotatory power and other optical properties of certain liquid crystals. *Acta Crystallogr.*, **4**: 219, 1951.
- [73] P. PALFFY-MUHORAY, E. C. GARTLAND, und J. R. KELLY. A new configurational transition in inhomogeneous nematics. *Liq. Cryst.*, **16** (4): 713, 1994.
- [74] S. SARLAH und S. ZUMER. Equilibrium structures and pretransitional fluctuations in a very thin hybrid nematic film. *Phys. Rev. E*, **60** (2): 1821, 1999.
- [75] J. KÖTZLER, D. A. GARANIN, M. HARTL, und L. JAHN. Evidence for critical fluctuations in bloch walls near their disordering temperature. *Phys. Rev. Lett.*, **71** (1): 177, 1993.
- [76] D. SVENSEK und S. ZUMER. Backflow-affected relaxation in nematic liquid crystals. *Liq. Cryst.*, **28** (9): 1389, 2001.
- [77] S. CHANDRASEKHAR. *Liquid Crystals*. Cambridge University Press, Cambridge, zweite Auflage, 1992.
- [78] T. W. STINSON und J. D. LITSTER. Pretransitional phenomena in the isotropic phase of a nematic liquid crystal. *Phys. Rev. Lett.*, **25** (8): 503, 1970.
- [79] H. KELKER und R. HATZ. *Handbook of Liquid Crystals*. Verlag Chemie, 1980.
- [80] WEB3DCONSORTIUM. <http://www.vrml.org>.
- [81] P. S. DRZAIC. *Liquid Crystal Dispersions*, Band 1 von *Series on Liquid Crystals*. World Scientific Publishing, Singapore, 1995.
- [82] POV-RAY (PERSISTENCE OF VISION). <http://www.povray.org>.

Verzeichnis der Abbildungen, Boxen und Tabellen

Abbildungen

- Annihilation
 - Konfigurationsplot, 80
- Biaxialitätsmaß, 10
- Defekte
 - Escape*, 20
 - Escape*, biaxialer, 19
 - ganzzahlig uniaxiale, 20
 - halbzahlig uniaxiale, 17
- Disklinationkern
 - Q**-Tensor, 82
 - Divergenz des Spannungstensors, 92
 - Elastische Energie, 84
 - Elastischer Anteil des Spannungstensors, 94
 - Gesamtenergie, 84
 - Geschwindigkeiten, 89
 - Stromlinien, 90
 - Volumenenergie, 84
- Freie Energie
 - Qualitativer Verlauf, 12
 - Verlauf der reskalierten, 49
- Homogene Strömung, 86
- MD-Zelle
 - Ausschalten als Labor, 67
 - Disklinationentstehung, 62, 63
 - Einschalten als Display, 59
 - Einschalten als Labor, 66
 - Phasendiagramm, 55
 - Schematisch, 53
 - Simulationsbox, 57
 - Transmissionsverlauf, 60
- Polarisationsmikroskopie, 5
- Twistübergang
 - $\text{sp}Q_{\alpha\beta}^2$, 76
 - $\text{sp}Q_{\alpha\beta}^3$, 76

3D Helix, 71

Abhängigkeit von k_{22} , 75

Biaxialität, 73

Eigenwerte, 72

Energiedichte, 75

Twistdisklination, 18

Boxen

Freie Energie, 36

reduzierte, 39

Impulsbilanz, 35

reduzierte, 42

Molekularfeld, 35

reduziertes, 42

Reduzierte Variablen, 38

Spannungstensor, 35

reduzierter, 42

Tabellen

Q für verschiedene Phasen, 7

Randbedingungen der MD-Zelle,

54

Strömungswiderstände, 93

Danksagung

Mein erster Dank gilt Prof. Trebin, der mir die Anfertigung der vorliegenden Arbeit ermöglicht hat. Er ließ mir bei der Gestaltung meiner Forschung große Freiheiten und hat mich stets unterstützt.

Herrn Prof. Herrmann danke ich für die Übernahme des Mitberichtes und die damit verbundene Mühe.

Im Laufe der Zeit ist die Flüssigkristallgruppe am ITAP immer kleiner geworden, bis sich zuletzt auch Dr. Holger Stark auf den Weg nach Konstanz gemacht hat. Mit ihm verbinden mich viele fruchtbare Diskussionen. Er hatte immer ein offenes Ohr für meine Probleme und ihm verdanke ich so manche Einsicht in das Gebiet der Flüssigkristalle und darüber hinaus.

Mit Dr. Joachim Stelzer habe ich zu Beginn dieser Arbeit eng zusammengearbeitet, von ihm habe ich das Forscherhandwerk gelernt. Auch nach seinem Abschied von der aktiven Wissenschaft stand er mir immer mit physikalischer und moralischer Unterstützung zur Seite. Dafür (und für die Mühe des Korrekturlesens) gilt ihm mein besonderer Dank.

Besondere Erwähnung verdienen Dr. Johannes Roth, Gunther Schaaf, Dr. Klaus Reimann, Dr. Franz Gähler und Uli Koschella. Ihre perfekte Systemadministration und ihr Wissen über Rechnerangelegenheiten haben wesentlich zum Erfolg dieser Arbeit beigetragen. Ihnen und allen anderen Institutsmitgliedern sei an dieser Stelle ein Dankeschön ausgesprochen für viele Gespräche und eine angenehme Arbeitsatmosphäre: Dr. Jürgen Bachteler, Dietmar Bunz, Dr. Jochen Englert, Jutta Hahn, Katharina Lieser, Michael Reichert, Klaus Reichle, Nicoletta Resta, Christof Rudhart, Thorsten Seitz, Andreas Strohm, Dieter Ventzki, Thilo Voss, Frank Weidner, Dr. Gabi Zeger.

Meinen Eltern danke ich für die großartige Unterstützung während der vergangenen Jahre.

Abschließend danke ich noch der Deutschen Forschungsgemeinschaft, die einen Teil dieser Arbeit im Rahmen des Sonderforschungsbereiches 382 „Verfahren und Algorithmen zur Simulation physikalischer Prozesse auf Höchstleistungsrechnern“ finanziell gefördert hat.