

AUTOREFERAT

1 IMIĘ I NAZWISKO

Jeffrey Christopher Everts

2 POSIADANE DYPLOMY I STOPNIE NAUKOWE

- **Doktor nauk fizycznych w zakresie fizyki**, 19.09.2016
Institute for Theoretical Physics, Utrecht University, Niderlandy
Tytuł rozprawy: *Colloidal dispersions of repulsive nanoparticles: tunable effective interactions, phase behaviour and anisotropy*.
Promotor: prof. dr. René van Roij
- **Magister fizyki (cum laude)**, 27.08.2012
Utrecht University, Niderlandy
Tytuł pracy: *Topological phases and fermionic superfluidity on the Lieb lattice*
Supervisor: prof. dr. Cristiane de Morais Smith
- **Tytuł licencjata w dziedzinie fizyki stosowanej (cum laude)**, 25.08.2010
Eindhoven University of Technology, Niderlandy
Tytuł pracy: *Expression of chirality by competing nucleated self-assembly*
Promotor: prof. dr. ir. Paul van der Schoot
- **Tytuł licencjata w dziedzinie inżynierii chemicznej i chemii (cum laude)**, 25.08.2010
Eindhoven University of Technology, Niderlandy
Tytuł pracy: *Expression of chirality in deuterated benzene-1,3,5, tricarboxamides*
Promotor: dr. Anja Palmans

3 INFORMACJE O DOTYCHCZASOWYM ZATRUDNIENIU W JEDNOSTKACH NAUKOWYCH

- **Adiunkt naukowo-dydaktyczny**, od października 2022,
Instytut Fizyki Teoretycznej, Wydział Fizyki, Uniwersytet Warszawski, Polska.
- **Staż podoktorski**, od lipca 2020,
Instytut Chemii Fizycznej, Polskiej Akademii Nauk, Warszawa, Polska.
- **Naukowiec wizytujący**, kwiecień 2019 – maj 2019,
University of Cambridge, Cambridge, Wielka Brytania.
- **Staż podoktorski**, styczeń 2017 – lipiec 2020,
Faculty for Mathematics and Physics, University of Ljubljana, Słowenia.
- **Doktorant**, wrzesień 2012 – wrzesień 2016,
Institute for Theoretical Physics, Utrecht University, Niderlandy.
- **Młodszy badacz**, kwiecień 2008 – październik 2010,
Spinoza Institute, Eindhoven University of Technology, Niderlandy.

4 OMÓWIENIE OSIĄGNIĘĆ, O KTÓRYCH MOWA W ART. 219 UST. 1 PKT. 2 USTAWY

A. TYTUŁ OSIĄGNIĘCIA NAUKOWEGO

Cykl publikacji pt.:

Elektryczne warstwy podwójne w płynach anizotropowych

B. LISTA PUBLIKACJI WCHODZĄCYCH W SKŁAD OSIĄGNIĘCIA

(odwrotny porządek chronologiczny) (†autor korespondencyjny, *równy wkład autorów w pracę)

- [A1] C. Dao, J. C. Everts, M. Ravnik, and Y. Tserkovnyak,
Nematronics: Reciprocal coupling between ionic currents and nematic dynamics,
Phys. Rev. Lett. **132**, 218303 (2023).
- [A2] J. C. Everts[†] and M. Ravnik,
Ionically charged topological defects in nematic fluids,
Phys. Rev. X **11**, 011054 (2021).
- [A3] J. C. Everts^{*}, B. Senyuk^{*}, H. Munder, M. Ravnik and I. I. Smalyukh,
Anisotropic electrostatic screening of charged colloids in nematic solvents,
Sci. Adv. **7**, eabd0662 (2021).
- [A4] J. C. Everts[†] and M. Ravnik,
Charge-, salt- and flexoelectricity-driven anchoring effects in nematics,
Liq. Cryst. **48**, 423 (2021).
- [A5] M. Ravnik and J. C. Everts[†],
Topological-defect-induced surface charge heterogeneities in nematic electrolytes,
Phys. Rev. Lett. **125**, 037801 (2020).

Szczegółowe informacje dotyczące mojego wkładu do powyższych publikacji zamieszczono w Załączniku nr 4.

Przedstawiony autoreferat jest tłumaczeniem wersji oryginalnie napisanej w języku angielskim, z którą Czytelnik może zapoznać się w Załączniku nr 3.

C. OPIS OSIĄGNIĘCIA NAUKOWEGO

1. Wprowadzenie

Ciekłe kryształy są fazami materii, które ze względu na swoją uporządkowaną strukturę makroskopową wykazują silnie anizotropowe właściwości fizyczne [1]. W niektórych przypadkach ciekłe kryształy płyną jak zwykła ciecz [2–4], podczas gdy w innych przypadkach odkształcają się elastycznie jak krystaliczne ciało stałe [5, 6]. Z punktu widzenia łamania symetrii, takie właściwości można zrozumieć na podstawie ich częściowo uporządkowanej struktury: symetria obrotowa cieczy izotropowej jest łamana przez ciekły kryształ, ale symetria translacyjna pozostaje nienaruszona lub jest łamana tylko częściowo. Oczywiście jest to możliwe tylko wtedy, gdy interakcje między cząsteczkami składowymi ciekłego kryształu (tzw. mezogenami) są same w sobie anizotropowe. Nie jest zaskoczeniem, że ze względu na wiele możliwości realizacji takich anizotropowych oddziaływań (np. poprzez kształt cząstek [7, 8])

lub poprzez wykorzystanie określonych grup chemicznych [9]), można realizować różne rodzaje ciekłych kryształów. Najprostszym typem ciekłego kryształu - który zajmuje również jedno z dwóch centralnych miejsc w tym osiągnięciu naukowym - są tak zwane nematyczne ciekłe kryształy. W takich układach wszystkie mezogeny (np. pręty) skierowane są średnio w tym samym kierunku, ale ich środki mas nie wykazują żadnego uporządkowania translacyjnego dalekiego zasięgu. Co więcej, istnieje szcztakowa symetria góra-dół \mathbb{Z}_2 , która odróżnia takie układy od faz polarnych, takich jak ferromagnetyki. Nematyczne ciekłe kryształy są realizowane w różnych układach. Przykłady obejmują układy molekularne przypominające pręty (np. 4-cyjano-4'-pentyllobifenyl, znany również jako 5CB [10]), ale także układy koloidalne z cząstkami w kształcie prętów, takie jak wirus mozaiki tytoniowej [11] lub kolonie bakteryjne [12].

W praktyce ciekłe kryształy nematyczne rzadko są (czystymi) układami jednoskładnikowymi. Na przykład koloidalne nematyki są zanurzone w rozpuszczalniku (np. wodzie), a molekularne ciekłe kryształy często zawierają wiele zanieczyszczeń lub domieszek. Wspólną cechą obu typów ciekłych kryształów jest to, że cząsteczkom tworzącym fazę nematyczną często towarzyszą jony [13–15], stanowiące główny przedmiot badań obecnego cyklu. Pomimo ich obfitości w ciekłych kryształach, rola jonów w tych układach jest zaskakująco słabo poznana, w przeciwieństwie do ich dobrze zbadanego statusu w cieczach izotropowych, gdzie dobrze wiadomo, że jony - w kontakcie z naładowanymi powierzchniami - tworzą struktury znane jako elektryczne warstwy podwójne [16]. Elektryczna podwójna warstwa składa się z dwóch warstw ładunku: (i) rozkładu ładunku powierzchniowego na powierzchni i (ii) rozproszonej warstwy ładunku rezydującej w cieczy, która jest w kontakcie z naładowaną powierzchnią. Ta druga rozproszona warstwa powstaje w wyniku konkurencji entropii, sprzyjającej jednorodnemu rozmieszczeniu jonów, oraz oddziaływania Coulomba, które np. sprzyja temu, aby jony znajdowały się w stanie związanym [17] lub aby jony o przeciwnym ładunku znajdowały się jak najbliżej naładowanej powierzchni. W tym osiągnięciu opisujemy strukturę przestrzenną takich podwójnych warstw elektrycznych w ciekłych kryształach nematycznych, a w szczególności przedstawiamy niektóre konsekwencje ich obecności.

Prace [A1-A5] wybrane do osiągnięcia naukowego opisują ważny wkład w zrozumienie efektów elektrycznych warstw podwójnych w ciekłych kryształach nematycznych, w stanie równowagi i poza nim. W naszej pracy systematycznie zwiększaliśmy złożoność układów, aby zrozumieć różne efekty wynikające z wzajemnego oddziaływania jonów oddziałujących z tłem nematycznym. Ponadto wyniki te prowadzą również do nowych pytań, które otwierają wiele drzwi dla nowych badań teoretycznych i eksperymentalnych. Poniżej przedstawiamy wyniki opisujące w szczególności

- (i) Wpływ ekranowanych pól elektrycznych na orientację mezogenów w pobliżu naładowanej powierzchni [A4].
- (ii) Anizotropowe ekranowanie i jego wpływ na oddziaływania międzycząsteczkowe naładowanych cząstek koloidalnych w ośrodku nematycznym [A3].
- (iii) Strukturę elektrycznych warstw podwójnych wokół defektów topologicznych i ich wpływ na naładowane powierzchnie [A2, A5].
- (iv) Sprzężona dynamika ciekłych kryształów i elektrokinetyka jonów oraz jej konsekwencje w niektórych prostych geometriach [A1].

Struktura dalszej części autoreferatu jest następująca: aby uzyskać spójną prezentację wyników, najpierw poświęcamy trochę miejsca na omówienie modeli zastosowanych w tych badaniach w sekcji C.2. Następnie przedstawiamy główne wyniki osiągnięć naukowych w sekcji C.3. Na koniec, w sekcji C.4 kończymy podsumowaniem i spojrzeniem na to, w jaki sposób wyniki te ukierunkują przyszłe badania w tej dziedzinie, w tym moje przyszłe plany.

2. Mezoskopowe modelowanie efektów elektrostatycznych i elektrokinetycznych w płynach nematicznych

I. Efekty równowagowe

Opisanie mieszaniny anizotropowych cząstek z jonami z mikroskopowego punktu widzenia jest trudnym zadaniem. Dlatego nieuniknione jest uciekanie się do przybliżeń. Co więcej, rozpoczęcie od najprostszych możliwych modeli jest zawsze korzystne dla uzyskania niezbędnego wglądu. Na szczęście, ponieważ jony są dobrze zbadane w cieczach izotropowych, mamy ważne źródło inspiracji do opisu nematicznych domieszkowanych jonami. Dla uproszczenia weźmiemy tylko dwa gatunki jednowartościowych jonów składających się z kationów (+) i anionów (-), opisanych przez ich (lokalne) profile gęstości liczbowej $\rho_{\pm}(\mathbf{r})$. Inspirując się dobrze znaną teorią Poissona-Boltzmana dla podwójnych warstw elektrycznych w zwykłych cieczach [18], zakładamy, że właściwości dielektryczne ośrodka nematicznego są opisane przez tensor dielektryczny ϵ . W przeciwieństwie do cieczy izotropowych, ośrodek nematiczny nie może być pozbawiony struktury. W tym przypadku opisujemy porządek nematiczny za pomocą tensorowego (kwadrupolowego) parametru porządku $\mathbf{Q}(\mathbf{r})$. W tym przypadku największa wartość własna tego symetrycznego i bezśladowego tensora rzędu 2 $S(\mathbf{r})$, zdefiniowana jako tak zwany skalarny parametr porządku, opisuje stopień orientacyjnego porządku wzdłuż towarzyszącego (znormalizowanego) wektora własnego $\hat{\mathbf{n}}$, znanego jako kierunek nematiczny. Kierunek jest miarą średniej orientacji mezogenów i spełnia relację równoważności $\hat{\mathbf{n}} \sim -\hat{\mathbf{n}}$ ze względu na wspomnianą wcześniej symetrię góra-dół. Z pomocą $\mathbf{Q}(\mathbf{r})$ możemy sparametryzować tensor dielektryczny jako [1]

$$\epsilon(\mathbf{r}) = \bar{\epsilon} \mathbf{I} + \frac{2}{3} \epsilon_m^a \mathbf{Q}(\mathbf{r}). \quad (1)$$

Tutaj $\bar{\epsilon}$ jest stałą dielektryczną fazy izotropowej, a molekularna anizotropia dielektryczna ϵ_m^a (dla uproszczenia przyjęta jako stała) opisuje wpływ porządku nematicznego na ϵ . Określenie ϵ w kategoriach \mathbf{Q} oznacza, że określona struktura nematiczna determinuje profil ładunków związanych, które elektrostatycznie łączą się z $\rho_{\pm}(\mathbf{r})$. Ponadto należy zauważyć, że określenie $\epsilon = \epsilon(\mathbf{Q})$ opisuje - po wstawieniu do wyrażenia na elektrostatyczną energię swobodną - w jaki sposób anizotropia dielektryczna wpływa na dyrektor nematiczny w obecności pola elektrycznego. Ten tak zwany efekt Fréederiksa [19] jest dobrze znany ze względu na jego znaczenie dla działania większości komercyjnych wyświetlaczy ciekłokrystalicznych [20].

Oprócz anizotropii dielektrycznej, deformacja tekstury nematicznej może prowadzić, w zależności od właściwości mezogenów, do makroskopowej polaryzacji [21]. Ta tak zwana polaryzacja fleksoelektryczna \mathbf{P}_f jest dana w przybliżeniu jednej stałej jako

$$\mathbf{P}_f(\mathbf{r}) = G \nabla \cdot \mathbf{Q}(\mathbf{r}), \quad (2)$$

gdzie G jest stałą elastoelektryczną. Ściśle mówiąc, polaryzacja elastoelektryczna jest związana z gradientami w $\hat{\mathbf{n}}(\mathbf{r})$, co prowadzi do niezerowego $\mathbf{P}_f(\mathbf{r})$. Równanie. (2) zawiera również efekty elektryczności rzędu, gdzie również gradienty postaci $\nabla S(\mathbf{r})$ skutkują makroskopową polaryzacją. Tutaj będziemy używać terminu polaryzacja fleksoelektryczna w bardziej luźnym znaczeniu, które obejmuje efekty pochodzące z niejednorodnej tekstury w kategoriach zarówno $\hat{\mathbf{n}}(\mathbf{r})$, jak i $S(\mathbf{r})$ (oraz dwuosiowych parametrów porządku). Co więcej, inne gradienty w $\mathbf{Q}(\mathbf{r})$ powinny być zasadniczo uwzględnione w równaniu. (2), na przykład $Q_{\lambda\sigma}(\mathbf{r})\partial_{\alpha}Q_{\lambda\sigma}(\mathbf{r})$, $Q_{\lambda\sigma}(\mathbf{r})\partial_{\sigma}Q_{\alpha\lambda}(\mathbf{r})$, oraz $Q_{\lambda\sigma}(\mathbf{r})\partial_{\alpha}Q_{\lambda\sigma}(\mathbf{r})$, i $Q_{\alpha\sigma}(\mathbf{r})\partial_{\lambda}Q_{\lambda\sigma}(\mathbf{r})$, gdzie zastosowaliśmy konwencję sumowania Einsteina, która prowadzi do włączenia modów elastoelektrycznych, które mogą różnić się wielkością [22]. Jednakże, aby zmniejszyć liczbę wolnych parametrów, wybraliśmy przybliżenie z jedną stałą, a w szczególności postać równania. (2), ponieważ jest ona najprostsza do implementacji numerycznej. Należy zauważyć, że polaryzacja fleksoelektryczna wytwarza gęstość ładunku granicznego, $-\nabla \cdot \mathbf{P}_f(\mathbf{r})$, która nie jest wytwarzana przez $\epsilon(\mathbf{r})$, z którym jony łączą się poprzez oddziaływania elektrostatyczne.

Ostatnim wprowadzonym przez nas sprzężeniem jonowo-nematycznym jest zewnętrzny potencjał dla jonów dany przez

$$V_{\pm}(\mathbf{r}) = k_{\text{B}}T g_{\pm} \text{Tr}[\mathbf{Q}(\mathbf{r})^2], \quad (3)$$

z g_{\pm} bezwymiarowymi energiami transferu Gibbsa [23–25]. Powyższy potencjał zewnętrzny określa ilościowo, jaki jest koszt energii swobodnej przeniesienia jonu z cieczy izotropowej do fazy nematycznej o danym $\mathbf{Q}(\mathbf{r})$. Innymi słowy, powyższy wkład modeluje różnicę rozpuszczalności między jonem w fazie nematycznej a jonem w fazie izotropowej. Jako pierwsi wprowadziliśmy taki wkład do energii swobodnej dla nematycznego ciekłego kryształu, patrz Ref. [A2]. Zauważamy, że inspiracja do uwzględnienia takiego efektu pochodzi z obszernej literatury na temat modelowania podwójnych warstw elektrycznych w mieszaninach cieczy binarnych [26–29].

Energia swobodna Helmholtza może być teraz zapisana jako

$$F[\rho_{\pm}, \psi, \mathbf{Q}] = F_{\text{N}}[\mathbf{Q}] + F_{\text{I}}[\rho_{\pm}] + F_{\text{E}}[\rho_{\pm}, \psi, \mathbf{Q}] + \sum_{i=\pm} \int_V d\mathbf{r} \rho_i(\mathbf{r}) V_i(\mathbf{r}), \quad (4)$$

gdzie V oznacza objętość układu. Nematyczna energia swobodna ma standardową postać Landaua-de Gennesa

$$F_{\text{N}}[\mathbf{Q}] = \int_V d\mathbf{r} \left\{ \frac{L}{2} \partial_{\alpha} Q_{\beta\sigma}(\mathbf{r}) \partial_{\alpha} Q_{\beta\sigma}(\mathbf{r}) + \frac{A}{2} \text{Tr}[\mathbf{Q}(\mathbf{r})^2] + \frac{B}{3} \text{Tr}[\mathbf{Q}(\mathbf{r})^3] + \frac{C}{4} \{\text{Tr}[\mathbf{Q}(\mathbf{r})^2]\}^2 \right\}. \quad (5)$$

Elastyczność nematyczna została tutaj uwzględniona w przybliżeniu z jedną stałą elastyczną L . Ponadto A , B i C są parametrami Landaua-de Gennesa. W naszych wynikach używamy standardowych wartości tych parametrów dla typowego ciekłego kryształu (5CB) w temperaturze pokojowej. Jonowa energia swobodna F_{I} obejmuje wszystkie nieelektrostatyczne efekty jon-jon i jon-mezogen, takie jak oddziaływania steryczne i inne oddziaływania krótkiego zasięgu. Jednak w przypadku rozcieńczonych stężeń jonów wystarczy użyć postaci gazu doskonałego (jak w dobrze znanej teorii Poissona-Boltzmana) [18]

$$F_{\text{I}}[\rho_{\pm}] = k_{\text{B}}T \sum_{i=\pm} \int_V d\mathbf{r} \rho_i(\mathbf{r}) \{\ln[\rho_i(\mathbf{r})\Lambda_i^3] - 1\}. \quad (6)$$

Oddziaływania elektrostatyczne są zawarte w energii swobodnej pola średniego

$$F_{\text{E}}[\rho_{\pm}, \psi, \mathbf{Q}] = \int_V d\mathbf{r} \left[\mathbf{P}_{\text{f}}(\mathbf{r}) \cdot \nabla \psi(\mathbf{r}) + e q(\mathbf{r}) \psi(\mathbf{r}) - \frac{1}{2} \epsilon_0 \epsilon_{ij}(\mathbf{Q}(\mathbf{r})) \partial_i \psi(\mathbf{r}) \partial_j \psi(\mathbf{r}) \right], \quad (7)$$

gdzie ϵ_0 to przenikalność próżni, a e to jednostka ładunku elementarnego. Zauważmy, że wybraliśmy postać, w której $\psi(\mathbf{r})$ jest parametrem wariacyjnym [30]. W szczególności, $\delta F_{\text{E}}/\delta \psi(\mathbf{r}) = 0$ jest równoważne równaniu Poissona dla anizotropowego dielektryka o niezanikającej polaryzacji elastoelektrycznej. Aby obliczyć profile równowagowe $\rho_{\pm}(\mathbf{r})$, $\psi(\mathbf{r})$ i $\mathbf{Q}(\mathbf{r})$, wygodnie jest użyć zespołu osmotycznego, w którym jony są traktowane kanonicznie, tj. profile są określone przez

$$\min_{\rho_{\pm}, \psi, \mathbf{Q}} \left\{ F[\rho_{\pm}, \psi, \mathbf{Q}] - \sum_{i=\pm} \mu_i \int_V d\mathbf{r} \rho_i(\mathbf{r}) \right\}. \quad (8)$$

W tym przypadku jonowe potencjały chemiczne wynoszą $\mu_{\pm} = k_{\text{B}}T \ln(\rho_{\text{b}}\Lambda_{\pm}^3)$, gdzie $2\rho_{\text{b}}$ to *total* gęstość masowego zbiornika jonów. W niektórych przypadkach równanie (8) można obliczyć analitycznie, ale w większości przypadków minimalizację należy przeprowadzić numerycznie. Należy zauważyć, że oddzielne składowe energii swobodnej w równaniu (4) są dobrze zbadane. Jednak jako pierwsi połączyliśmy te wkłady, aby opisać płyn nematyczny z domieszką jonów. Wynikową teorię nazywamy teorią Poissona-Boltzmana-Landaua-de Gennesa (PBLdG) i uważamy, że jest to najprostszy model opisujący elektrolit nematyczny. Wyniki (i)-(iii) są związane z efektami

równowagi tej teorii. Co więcej, równanie (4) należy uzupełnić - w zależności od interesującej geometrii - o pewne swobodne energie powierzchniowe, co omówimy w opisie wyników, patrz rozdział C.3.

II. Efekty nierównowagowe

W wyniku (iv) zbadaliśmy efekty nematycznego elektrolitu poza równowagą w ramach liniowej nieodwracalnej termodynamiki [31]. W przypadku elektrolitów nematycznych ramy te obejmują efekty dyfuzji jonowej, odpowiedzi na pola elektryczne i przepływ płynu. W prostych geometriach takie efekty zostały zbadane eksperymentalnie w kontekście, na przykład, nieliniowej elektroforezy ciekłokrystalicznej [32, 33] i rolek elektrokonwekcyjnych [34]. Wnieśliśmy swój wkład poprzez włączenie powyższych efektów do samodzielnych ram teoretycznych, w tym wynikających z nich pozawibracyjnych sprzężeń nematojonowych, które nie były wcześniej badane w literaturze. Takie efekty różnią się od równowagowych sprzężeń nemato-jonowych, takich jak elastoelektryczność lub anizotropia dielektryczna omówiona w rozdziale C.2.I, ponieważ występują one tylko poza równowagą. Aby skonstruować te nierównowagowe wkłady, używamy zasady najmniejszego rozproszenia [35],

$$\frac{\delta}{\delta \dot{q}_i} \left\{ \frac{D}{Dt} \left[\frac{1}{2} \int d\mathbf{r} \rho_m \mathbf{v}(\mathbf{r}, t)^2 + F[\rho_{\pm}, \psi, \mathbf{Q}] \Big|_{\substack{\rho_{\pm}(\mathbf{r}) \rightarrow \rho_{\pm}(\mathbf{r}, t) \\ \psi(\mathbf{r}) \rightarrow \psi(\mathbf{r}, t) \\ \mathbf{Q}(\mathbf{r}) \rightarrow \mathbf{Q}(\mathbf{r}, t)}} \right] + \int_V d\mathbf{r} \mathcal{R} \right\} = 0. \quad (9)$$

Tutaj \dot{q}_i jest skrótowym zapisem dla wszystkich uogólnionych prędkości układu. Ponadto $D/Dt = \partial/\partial t + \mathbf{v} \cdot \nabla$ jest pochodną adwekcji względem „barycentrycznej” prędkości płynu $\mathbf{v}(\mathbf{r}, t)$. Pierwszy człon w nawiasach kwadratowych równania (9) to energia kinetyczna płynu o gęstości masy ρ_m , który przyjmujemy jako nieściśliwy, $\nabla \cdot \mathbf{v} = 0$. Wreszcie, \mathcal{R} to tak zwany Rayleighan, który uwzględnia efekty dyssypacyjne poza równowagą między różnymi polami.

W literaturze powyższy formalizm został wykorzystany do wyprowadzenia równań dla elektroforezy z ciekłymi kryształami w kategoriach \mathbf{Q} [36]. W pracy tej zaniedbano jednak dyssypacyjne sprzężenia nematojonowe. Aby uzyskać uproszczony obraz takich zjawisk, zbadaliśmy te efekty w przybliżeniu jednoosiowym, gdzie $\mathbf{Q} = (3/2)S[\hat{\mathbf{n}}\hat{\mathbf{n}} - (1/3)\mathbf{I}]$, przy stałej przestrzennej S . Ponadto, w ref. [A5] skupiliśmy się na sytuacji, w której $\mathbf{v} = 0$, aby wyodrębnić nowe efekty elektrokinetyczne. W tej sytuacji możemy skonstruować całkowity Rayleighan jako

$$\mathcal{R} = \mathcal{R}_N + \mathcal{R}_I + \mathcal{R}_C. \quad (10)$$

Tutaj nematyczny Rayleighan jest dany przez

$$\mathcal{R}_N = \frac{\alpha}{2} [\partial_t \hat{\mathbf{n}}(\mathbf{r}, t)]^2, \quad (11)$$

gdzie α oznacza lepkość rotacyjną. Dla części jonowej przyjmujemy postać dyfuzyjną

$$\mathcal{R}_I = \frac{1}{2} k_B T \sum_{i=\pm} \rho_i(\mathbf{r}, t) \mathbf{u}_i(\mathbf{r}, t) \cdot \mathbf{D}_i^{-1} \cdot \mathbf{u}_i(\mathbf{r}, t), \quad (12)$$

z \mathbf{D}_{\pm} (anizotropowym) tensorem dyfuzji jonowej, zaniedbując efekty dyfuzji krzyżowej. Dyssypacyjne sprzężenie strumieni jonowych z tłem nematycznym jest uchwycone przez

$$\mathcal{R}_C = \sum_{i=\pm} \gamma_i \rho_i(\mathbf{r}, t) \partial_t \hat{\mathbf{n}}(\mathbf{r}, t) \cdot \{[\mathbf{u}_i(\mathbf{r}, t) \cdot \nabla] \hat{\mathbf{n}}(\mathbf{r}, t)\}, \quad (13)$$

z fenomenologicznymi współczynnikami „tarcia” γ_{\pm} . Zauważmy, że zapisując \mathcal{R}_C , uwzględniliśmy tylko te wyrażenia, które są niezmiennie przy niezależnych obrotach przestrzeni rzeczywistej i direktora nematycznego. Taka sztuczna symetria jest podobna do przybliżenia równej stałej, które jest często stosowane dla elastycznej energii swobodnej Franka. Zasadniczo można dodać więcej wyrażeń, ale skupiamy się tutaj na najprostszych składnikach.

Dla danego \mathcal{R} uogólnione prędkości to \mathbf{u}_\pm i $\partial_t \hat{\mathbf{n}}$. Minimalizacja względem \mathbf{u}_\pm przy użyciu równania. (9) daje

$$\mathbf{u}_\pm(\mathbf{r}, t) = -\frac{1}{k_B T} \mathbf{D}_\pm \cdot \left[\nabla \frac{\delta F}{\delta \rho_\pm(\mathbf{r}, t)} + \boldsymbol{\mathcal{E}}_\pm(\mathbf{r}, t) \right], \quad (14)$$

gdzie generowana jest dodatkowa siła „motoryczna” określona przez

$$\boldsymbol{\mathcal{E}}_\pm(\mathbf{r}, t) = \gamma_\pm \nabla \hat{\mathbf{n}}(\mathbf{r}, t) \cdot \partial_t \hat{\mathbf{n}}(\mathbf{r}, t). \quad (15)$$

Wzór (14) należy połączyć z równaniem ciągłości $\partial_t \rho_\pm(\mathbf{r}, t) + \nabla \cdot [\rho_\pm(\mathbf{r}, t) \mathbf{u}_\pm(\mathbf{r}, t)] = 0$. Zauważmy, że dla izotropowej dyfuzji jonowej i $\boldsymbol{\mathcal{E}}_\pm = 0$ wynik ten jest po prostu dobrze znaną teorią Poissona-Nernsta-Plancka dla elektrokinetyki izotropowego elektrolitu [37]. Wariacja względem $\partial_t \hat{\mathbf{n}}$ daje następujące wyniki

$$\alpha \partial_t \hat{\mathbf{n}}(\mathbf{r}, t) = -[\mathbf{h}_\perp(\mathbf{r}, t) + \mathbf{h}_d(\mathbf{r}, t)]. \quad (16)$$

Pole molekularne jest tutaj określone przez $\mathbf{h}_\perp = \hat{\mathbf{n}} \times \delta F / \delta \hat{\mathbf{n}} \times \hat{\mathbf{n}}$, gdzie iloczyny wektorowe są dodawane w celu zapewnienia normalizacji $|\hat{\mathbf{n}}| = 1$. Pole dyssypatywne jest dane przez

$$\mathbf{h}_d(\mathbf{r}, t) = \sum_{i=\pm} \gamma_i \rho_i(\mathbf{r}, t) \{[\mathbf{u}_i(\mathbf{r}, t) \cdot \nabla] \hat{\mathbf{n}}(\mathbf{r}, t)\}. \quad (17)$$

Zauważmy, że uogólnione siły $\boldsymbol{\mathcal{E}}_\pm$ i \mathbf{h}_d są odwrotnościami Onsagera z uogólnionymi strumieniami $\partial_t \hat{\mathbf{n}}$ i $\rho_\pm \mathbf{u}_\pm$. Są to nowe sprzężenia, które wprowadziliśmy w ref. [A1]. W rozdziale C.3.IV omawiamy niektóre z reperkusji tych wzajemnych sprzężeń nemato-jonowych.

3. Opis wyników

I. Wpływ pola elektrycznego na zakotwiczenie

W artykule [A4] zbadaliśmy wpływ naładowanej powierzchni i towarzyszącej jej podwójnej warstwy na zakotwiczenie powierzchni. Zakotwiczenie to narzucone przez powierzchnię uporządkowanie cząstek w pobliżu powierzchni zewnętrznej, takiej jak ściana z polimeru lub szkło [38]. Używając różnych rodzajów materiałów z różnorodną obróbką fizykochemiczną powierzchni, można zrealizować orientacyjne uporządkowanie powierzchni w prawie każdym dowolnym kierunku, takim jak planarne [39], prostopadłe (homeotropowe) [40], pochylone orientacje [41], w tym wzorowanie powierzchni kombinacji tych (patrz także Sec. C.3.III). W zastosowaniach technologicznych manipulowanie zakotwiczeniem powierzchni jest cenne w produkcji wyświetlaczy [20], czujników [42] i mikroprzepływów [43]. Metodologicznie rzecz biorąc, efekty zakotwiczenia powierzchni można uwzględnić w formalizmie Sec. C.2. poprzez uwzględnienie odpowiedniego terminu swobodnej energii powierzchniowej, który na poziomie równań Eulera-Lagrange’a nakłada warunki brzegowe na parametr rzędu. Popularną swobodną energią powierzchniową jest tak zwana forma Rapini-Papoular [44],

$$F_S[\mathbf{Q}] = \frac{W}{2} \int_{\Omega} dS \operatorname{tr}[(\mathbf{Q} - \mathbf{Q}^0)^2], \quad (18)$$

dla danej siły zakotwiczenia W i narzuconego parametru porządku powierzchni \mathbf{Q}^0 . Całka dotyczy powierzchni Ω . W połączeniu z innymi składnikami energii swobodnej, parametr uporządkowania powierzchni jest określany przez kombinację elastyczności nematycznej, określonej przez wartość stałej (stałych) sprężystości, wartość W i rozmiar układu. Gdy powierzchnia ta jest naładowana elektrycznie, pojawią się dodatkowe efekty wynikające z pola elektrycznego wytwarzanego przez naładowaną powierzchnię.

Skupiliśmy się tutaj na najprostszej możliwej geometrii płyty ograniczonej dwiema równoległymi płaskimi płytami, którą można modelować w jednym wymiarze przestrzennym ze względu na niezmienniczość translacyjną w płaszczyźnie. Rozważamy sytuację, w której dolna powierzchnia jest naładowana

i opisana przez swobodną energię powierzchniową Rapini-Papoulara, podczas gdy górna powierzchnia jest nienaładowana z silnym zakotwiczeniem homeotropowym. Zakotwiczenie powierzchniowe powoduje, że dyrektor jest równoległy do dolnej płyty, ale ta sytuacja indukuje elastyczne zniekształcenie w komórce - ponieważ dyrektor jest zmuszony do bycia prostopadłym do górnej powierzchni - co jest energetycznie kosztowne. Dlatego elastyczność nematyczna kieruje układ w stronę stanu, w którym odkształcenie sprężyste jest zminimalizowane, a tym samym, w którym dyrektor jest prostopadły do dolnej płyty. Innymi słowy, efekty zakotwiczenia i elastyczności konkurują w tej geometrii. Naładowana powierzchnia wytwarza pole elektryczne prostopadłe do płyty. Gdy uwzględnimy tylko anizotropię dielektryczną, otrzymamy elektrostatyczną gęstość energii swobodnej w postaci $\sim -\Delta\epsilon(\hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{E})^2$, gdzie \mathbf{E} to lokalne pole elektryczne, a $\Delta\epsilon = \epsilon_m^a S$ (patrz równanie (1)) współczynnik anizotropii dielektrycznej. Gdy $\Delta\epsilon > 0$, odpowiedni moment dielektryczny popycha lokalny dyrektor tak, aby był prostopadły do obu powierzchni. Gdy obecne są jony, to pole elektryczne jest ekranowane i można dostroić zakres pola elektrycznego za pomocą zawartości jonów, zgodnie z długością ekranowania Debye'a.

W artykule [A4] systematycznie badaliśmy wzajemne oddziaływanie (ekranowanego) pola elektrycznego, elastyczności nematycznej i zakotwiczenia powierzchni poprzez określenie orientacji dyrektora na dolnej płycie. Odpowiednie równania Eulera-Lagrange'a zostały rozwiązane numerycznie przy użyciu metod elementów skończonych. Ponadto uwzględniliśmy również efekty tak zwanej regulacji ładunku [45], gdzie gęstość ładunku powierzchniowego na dolnej płycie jest funkcją zawartości jonów, a tym samym długości Debye'a układu. Może to być realizowane mikroskopowo przez grupy chemiczne na interesującej nas powierzchni. Interesujące zjawiska występują, gdy zwiększenie długości Debye'a zwiększa zakres pola elektrycznego, ale zmniejsza ładunek powierzchniowy, co daje niemonotoniczne efekty orientacji dyrektora dolnej powierzchni w funkcji długości Debye'a. Wreszcie, zbadaliśmy również wpływ elastoelektryczności, która wytwarza dodatkowe pole polaryzacyjne, które wpływa na lokalny profil dyrektora. Podsumowując, doszliśmy do wniosku, że możliwe jest dostrojenie uporządkowania powierzchni poprzez zawartość soli w układzie - pod warunkiem, że można ją dokładnie kontrolować eksperymentalnie (co może być wyzwaniem w sytuacjach praktycznych).

II. Przesiewanie anizotropowe

W elektrostatyce dobrze wiadomo, że naładowana cząstka ustawiona w początku naszego układu współrzędnych wytwarza potencjał elektrostatyczny, który asymptotycznie rozkłada się jak $\psi(\mathbf{r}) \sim 1/r$ dla $r \rightarrow \infty$, niezależnie od kształtu cząstki. Gdy takiej cząstce towarzyszy elektryczna warstwa podwójna, na przykład poprzez zanurzenie cząstki w wodzie, sytuacja się zmienia, a zależność asymptotyczna zostaje zmieniona na [46–48].

$$\psi(\mathbf{r}) \sim \mathcal{A}(\varphi, \theta) \frac{\exp(-r/\ell_D)}{r}, \quad (r \rightarrow \infty), \quad (19)$$

z ℓ_D długością Debye'a. Tutaj $\mathcal{A}(\varphi, \theta)$ jest tak zwaną funkcją anizotropii, która zależy od kąta azymutalnego φ i kąta biegunowego θ . Co więcej, $\mathcal{A}(\varphi, \theta) = 1$ dla kuli, ale dla każdego innego niesferycznego kształtu cząstki, dziedziczy ona „kształt” cząstki, co jest ważne nawet nieskończenie daleko od cząstki, w przeciwieństwie do przypadku nieekranowanego. Należy zauważyć, że istnieje tylko jedna długość rozpadu ℓ_D , która nie zależy od żadnego kąta.

W ośrodku nematycznym sytuacja różni się od równania (19). W artykule [A3] zbadaliśmy, w jaki sposób równanie (19) zmienia się, gdy cząstka jest izotropowa (tj. kula), ale ośrodek jest anizotropowy: w naszym przypadku płyn nematyczny ze stałym przestrzennie polem kierującym. Wykorzystując teorię Poissona-Boltzmana z anizotropowym tensorem dielektrycznym sparametryzowanym w obrazie dyrektora jako $\epsilon = \epsilon_{\perp} \mathbf{I} + \Delta\epsilon \hat{\mathbf{n}}\hat{\mathbf{n}}$, z $\Delta\epsilon = \epsilon_{\parallel} - \epsilon_{\perp}$ obliczyliśmy asymptotyczne zachowanie $\psi(\mathbf{r})$. Znajdujemy jawną zależność

$$\psi(\mathbf{r}) \sim \tilde{\mathcal{A}}(\theta) \frac{\exp[-r/\ell_D^N(\theta)]}{r}, \quad (r \rightarrow \infty). \quad (20)$$

Podobnie jak w przypadku cząstki anizotropowej w ośrodku izotropowym, asymptotyczny rozkład $\psi(\mathbf{r})$ jest modulowany przez funkcję anizotropii $\tilde{A}(\theta)$, która ze względów symetrii zależy tylko od kąta θ pomiędzy \mathbf{r} i przestrzennie jednorodnym директором $\hat{\mathbf{n}}$. Różnica w stosunku do równania (19) polega jednak na pojawieniu się anizotropowej długości Debye’a, określonej dokładnym wyrażeniem

$$\ell_D^N(\theta) = \ell_D \sqrt{\frac{\epsilon_{\perp} \epsilon_{\parallel}}{\bar{\epsilon}(\epsilon_{\parallel} - \Delta\epsilon \cos^2 \theta)}}. \quad (21)$$

Tutaj ℓ_D należy interpretować jako długość Debye’a „hipotetycznego” układu izotropowego przy tym samym stężeniu jonów i temperaturze. Gdy porównamy elektryczną podwójną warstwę otaczającą naładowaną kulę w ośrodku nematycznym z $\epsilon_{\parallel} > \epsilon_{\perp}$ z warstwą prostopadłościenną sferoidy w ośrodku izotropowym, zauważymy, że linie izopotencjalne blisko powierzchni cząstki mają podobny kształt w obu przypadkach. Jednak asymptotyczny rozkład $\psi(\mathbf{r})$ jest znacznie inny, porównaj równanie (19) z równaniem (20), ze względu na pojawienie się anizotropowej długości Debye’a określonej równaniem (21). W ref. [A3] uzyskaliśmy również dokładne wyrażenia analityczne dla $\psi(\mathbf{r})$ ważne dla wszystkich \mathbf{r} przy użyciu opracowanej przez nas metody półanalitycznej [49] w połączeniu z rozszerzeniem wielobiegunowym.

Niestety, przy obecnym stanie wiedzy nie są możliwe bezpośrednie pomiary elektrycznej warstwy podwójnej pojedynczej cząstki. Dlatego, aby rozszerzyć znaczenie eksperymentalne, obliczyliśmy efektywny potencjał oddziaływania między parą naładowanych kulek o jednakowych rozmiarach, aby zobaczyć efekty anizotropowej warstwy podwójnej. W tym przypadku ponownie wykorzystaliśmy metody z pracy Ref. [49] w połączeniu z rozszerzeniem wielobiegunowym. Ponadto, poprzez porównanie z numerycznymi obliczeniami elementów skończonych, wykazaliśmy, że metoda ta daje dokładne wyrażenia na efektywny potencjał pary, przy czym odchylenia od wyników numerycznych występują tylko wtedy, gdy cząstki są blisko kontaktu. W praktyce trudno jest eksperymentalnie zrealizować jednolite pole kierujące wokół cząstek sferycznych. Dlatego przetestowaliśmy naszą teorię za pomocą eksperymentów dla przypadku, w którym defekt pierścienia Saturna otacza cząstki. W nienaładowanym przypadku taki defekt powoduje kwadrupolowe efektywne oddziaływania elastyczne par, dla których istnieją również wyrażenia analityczne w rozwinięciu wielobiegunowym [40]. Dlatego też, przy założeniu liniowej addytywności, można dodać oddziaływanie elastyczne i oddziaływanie van der Waalsa do naszych obliczonych ekranowanych efektywnych oddziaływań kulombowskich z anizotropowymi podwójnymi warstwami. Ponadto zastosowaliśmy przybliżenie, które nie uwzględniało zniekształceń sprężystych w efektywnych oddziaływaniach elektrostatycznych.

Wynikowa teoria przewiduje płytkie minimum dla wystarczająco dużych separacji międzycząsteczkowych rzędu jednej do kilku średnic cząstek. Tak szeroko rozdzielone stany metastabilne cząstek nie istnieją dla pary naładowanych cząstek w cieczy izotropowej - jak dobrze wiadomo ze słynnej teorii Derjaguin-Landau-Verwey-Overbeek (DLVO) [50, 51] - z powodu braku (przyciągających) nematycznych oddziaływań sprężystych. Co więcej, nasza teoria wykazała, że metastabilny kąt równowagi wektora separacji z (dalekim) jednolitym polem kierującym jest przesunięty o kilka stopni w porównaniu z przypadkiem ekranowania izotropowego. Choć pozornie jest to niewielki efekt, w artykule [A3] eksperymentalnie rozwiązaliśmy metastabilną konfigurację równowagi, w której odchylenie kątowe od hipotetycznego przypadku izotropowego ekranowania elektrostatycznego w płynie nematycznym wynosiło około pięciu stopni.

III. Struktura elektrycznych warstw podwójnych w płynach nematycznych

Jak to często bywa w przypadku faz materii o złamanej symetrii, ciecze nematyczne mogą zawierać obszary topologicznie chronionych wzorów zwanych defektami topologicznymi [52], w których podstawowy parametr porządku jest sfrustrowany. W przypadku objętościowych płynów nematycznych obecność defektu topologicznego oznacza, że istnieje obszar, w którym zniekształcenia sprężyste

są lokalnie osobiliwe. Aby uciec od tak wysokiego kosztu elastycznej energii swobodnej, uporządkowanie nematyczne w rdzeniu defektu topi się do izotropowego rdzenia, w którym skalarny parametr uporządkowania S jest lokalnie zmniejszony w stosunku do nematycznej wartości objętościowej [53]. W przeciwieństwie do ferromagnetyków, defekty nematyczne mogą przenosić pół-integralne wartości niezmienników topologicznych ze względu na resztkową symetrię \mathbb{Z}_2 [1]. Co więcej, w ciekłych kryształach obecne techniki eksperymentalne pozwalają na wysoki stopień przestrzennej manipulacji defektami, z wykorzystaniem pól elektrycznych [54], magnetycznych [55] i optycznych [56], ale także przepływu cieczy [57]. W połączeniu z eksperymentalnymi narzędziami do realizacji różnych defektów topologicznych w cieczach nematycznych, takich jak pętle, punkty, solitony, a nawet węzły [58–60], oczywiste jest, że defekty topologiczne stanowią niezbędne narzędzie do manipulowania anizotropowymi właściwościami ciekłego kryształu.

W artykule [A2] zbadaliśmy, czy defekty topologiczne w objętościowej cieczy nematycznej mogą funkcjonować jako obszary lokalnej separacji ładunków dla jonów. W objętościowych cieczach izotropowych nie jest to możliwe, ponieważ jakakolwiek lokalna separacja ładunków jest realizowana poprzez tworzenie elektrycznych warstw podwójnych, co wymaga obecności naładowanych powierzchni, takich jak naładowane ściany lub naładowane cząstki koloidalne [61]. Co więcej, w cieczach izotropowych nie występują defekty topologiczne ze względu na niezmiennosc rotacyjną i translacyjną układu. W ciekłych kryształach istnieje jednak wiele sposobów realizacji różnych defektów topologicznych. Co więcej, obecność stopionego izotropowego rdzenia i otaczające go duże zniekształcenia sprężyste w naturalny sposób wprowadzają sprzężenia nematojonowe odpowiednio poprzez fleksoelektryczność (równanie (2)) i różnice rozpuszczalności jonów (równanie (3)).

Korzystając z kombinacji metod analitycznych i numerycznych pełnej teorii PBLdG omówionej w rozdziale C.2.I, zbadaliśmy kilka geometrii, w których może wystąpić separacja ładunków jonowych. Najprostszą (jednowymiarową) geometrią jest geometria interfejsu izotropowo-nematycznego. Mogliśmy wyprowadzić analityczne wyrażenia dla gęstości jonów i profili potencjału w tym przypadku. Stwierdziliśmy, że w poprzek izotropowo-nematycznego interfejsu tworzy się elektryczna warstwa podwójna typu back-to-back, podobnie jak w przypadku jonowo naładowanego interfejsu olej-woda [62]. Różnica polega na tym, że w tym przypadku rolę może odgrywać również elektryczność porządkowa, która może zmieniać znak i wielkość ładunków powstających po obu stronach interfejsu.

W przypadku wszystkich innych geometrii uciekliśmy się do numerycznych obliczeń elementów skończonych. W szczególności zbadaliśmy separację ładunków jonowych w promieniowych defektach jeżowych [63], półintegralnych dyslokacjach klinowych [64], a także w defektach pierścienia Saturna i defektach punktowych, które tworzą się wokół sferycznej cząstki koloidalnej z homeotropowym zakontrawieniem [40]. We wszystkich przypadkach stwierdziliśmy, że profil gęstości ładunku jonowego jest zgodny z profilem ładunków związanych wytwarzanych przez fleksoelektryczność, gdy długość Debye’a jest wystarczająco mała. Jednak profile ładunków są poszerzone, gdy długość Debye’a jest większa. Innymi słowy, dla małej liczby jonów koszt entropowy podążania za wzorcem fleksoelektrycznym jest zbyt mały w porównaniu do korzyści płynących ze spełnienia lokalnej neutralności ładunku. Nie stanowi to jednak problemu, gdy obecna jest wystarczająco duża liczba jonów. Z drugiej strony, sprzężenie wprowadzone w równaniu (3) łączy izotropowy rdzeń defektu (dla $g_{\pm} > 0$), ponieważ jony są ogólnie rzecz biorąc bardziej rozpuszczalne w fazie izotropowej. Wynikowe profile gęstości jonów wynikają z tych dwóch efektów, tj. Z różnic w elastoelektryczności i rozpuszczalności jonów. Dzięki tym efektom odkryliśmy, że w przeciwieństwie do elektrolitu izotropowego, w którym powstają tylko podwójne warstwy elektryczne, (objętościowy) elektrolit nematyczny może nawet zawierać wielowarstwy elektryczne, w których spotykają się trzy lub więcej obszarów ładunków dodatnich i ujemnych.

W artykule [A2] skupiliśmy się na tym, jak rozproszona warstwa jonów ulega redystrybucji w strukturze nematycznej. Jednakże, jak wspomniano we wstępie, elektryczna warstwa podwójna może również wiązać się z obecnością naładowanych powierzchni. W artykule [A5] pokazaliśmy, że defekty topolo-

giczne mogą wpływać na lokalny rozkład ładunku powierzchniowego na naładowanej ścianie lub wokół naładowanych cząstek koloidalnych. Najprostszą geometrią do zademonstrowania tego zjawiska jest geometria płyty składającej się z dwóch równoległych ścian. W odróżnieniu od stosunkowo prostych konfiguracji dyrektorów w artykule [A4], użyliśmy teraz naładowanej płyty dolnej, na której zamocowaliśmy dwuwymiarowy nematyczny wzór powierzchniowy za pomocą silnych warunków kotwiczenia. Górna płyta jest nienaładowana z przestrajalną homeotropową siłą kotwiczenia W . Wzór nematyczny na dolnej płycie został wybrany w taki sposób, że dla małych wartości W na górnej płycie występuje defekt powierzchniowy, podczas gdy dla większych wartości W w płycie występuje defekt objętościowy $-1/2$ o przestrajalnym położeniu w zależności od wielkości W . Geometria ta modeluje sytuację, w której możemy quasi-statycznie przesunąć defekt z powierzchni górnej płyty w kierunku dolnej płyty za pomocą zewnętrznych pól. Gdy nałożymy warunki brzegowe regulacji ładunku [45] na dolną płytkę, takie jak warunki brzegowe stałego potencjału lub przyjmując pewną izotermę adsorpcji jonów w postaci Langmuira, stwierdzimy, że przesunięcie defektu bliżej dolnej powierzchni lokalnie zwiększa lub zmniejsza rozkład ładunku powierzchniowego w zależności od bliskości defektu topologicznego. Efekt ten występuje nawet wtedy, gdy występuje tylko anizotropia dielektryczna, ale jest bardziej wyraźny, gdy uwzględniona jest fleksoelektryczność.

Zbadaliśmy również bardziej skomplikowane geometrie, aby ocenić ogólność tego zjawiska fizycznego. Odkryliśmy, że generalnie możliwe jest manipulowanie rozkładem ładunku powierzchniowego na zewnętrznej ścianie lub cząstce, gdy istnieje prostopadły gradient kierunku, który zmienia się na powierzchni. Stosując tę ogólną zasadę, w artykule [A2] wykazaliśmy, że nawet dwuwymiarowe niejednorodne rozkłady ładunku powierzchniowego mogą być tworzone w geometrii płytowej przy użyciu linii defektów, które powstają w wyniku określonych warunków zakotwiczenia na obu płytach. Ponadto wykazaliśmy, że koncepcja ta utrzymuje się w naładowanych cząstkach koloidalnych, gdzie defekt pierścienia Saturna i defekt punktowy powodują znacząco różne rozkłady ładunku powierzchniowego wokół naładowanej kuli koloidalnej.

IV. Wzajemne efekty elektrokinetyki z dynamiką tekstury nematycznej

W artykule [A1] zbadaliśmy, jakie efekty fizyczne występują, gdy elektrolit nematyczny jest wyprowadzany z równowagi za pomocą prądów ładunkowych. Aby uzyskać wgląd analityczny, wykorzystaliśmy równania dynamiki wyprowadzone w rozdziale C.2.II i skupiliśmy się tylko na tak zwanym sektorze ładunkowym $e[\rho_+(\mathbf{r}) - \rho_-(\mathbf{r})]$. Zaniedbaliśmy sektor osmotyczny $\rho_+(\mathbf{r}) + \rho_-(\mathbf{r})$, rozszerzając równania wokół jednolitej gęstości nasypowej i zachowując jedynie wkład pierwszego rzędu. W tym uproszczonym ujęciu pełna dynamika jest określana przez uogólnione strumienie $\partial_t \hat{\mathbf{n}}$ i prąd ładunku jonowego \mathbf{j} . Oprócz sił napędowych, które pochodzą z energii swobodnej układu, mamy dyssypacyjne siły napędowe

$$\mathbf{h}_d = \gamma(\mathbf{j} \cdot \nabla)\hat{\mathbf{n}}, \quad \mathcal{E} = \gamma(\nabla\hat{\mathbf{n}}) \cdot (\partial_t \hat{\mathbf{n}}). \quad (22)$$

W tym przypadku istnieje tylko jedna stała sprzężenia dyssypacyjnego γ w porównaniu do dwóch stałych sprzężenia γ_{\pm} , gdy uwzględniony jest sektor osmotyczny, patrz rozdział C.2.II.

Ogólnie rzecz biorąc, pole dyssypacyjne \mathbf{h}_d wprowadza „moment obrotowy” na dyrektorze nematycznym, gdy prąd ładunku \mathbf{j} przepływa przez strukturę nematyczną. W konsekwencji, prąd jonowy w płynie nematycznym może napędzać teksturę nematyczną. Alternatywnie, ruch tekstury nematycznej prowadzi do powstania prądu ładunku, ponieważ jony są pompowane przez siłę napędową \mathcal{E} . Te dwa wzajemne efekty są podobne do pojęć momentu spinowego i pompowania spinowego, odpowiednio, w dziedzinie spintroniki [65]. Ta dziedzina nauki koncentruje się na manipulowaniu kwantowo-mechanicznym spinem elektronów poprzez wykorzystywanie ładunków elektronicznych do zastosowań w urządzeniach. Tutaj stworzyliśmy nematyczny odpowiednik spinowego momentu obrotowego i pompowania spinowego, w którym spin jest zastąpiony przez nematyczny dyrektor, a ładunki elektroniczne

przez ładunki jonowe. Wynikająca z tego dynamika, która wyłania się z wzajemnych nematyczno-jonowych sprzężeń dyssypacyjnych, jest podobna do działania śruby Archimedes: maszyny hydraulicznej, która albo pompuje wodę, albo generuje energię jako turbina [66].

Skupiliśmy się najpierw na geometrii płyty złożonej z dwóch równoległych płyt, aby pokazać konsekwencje dynamiki podobnej do śruby Archimedes. W tym przypadku nałożyliśmy silne warunki zakotwiczenia na obie płyty, z płaskim zakotwiczeniem na dolnej płycie i homeotropowym zakotwiczeniem na górnej płycie. W sytuacji quasistatycznej, w której przepuszczamy przez próbkę wolno zmieniający się prąd, okazuje się, że nematyczna tekstura łączy się z \mathbf{j} poprzez emergentną wielkość zwaną gęstością uzwojenia $\eta(z) = (\hat{\mathbf{n}} \times \partial_z \hat{\mathbf{n}}) \cdot \hat{\mathbf{x}}$. W tym wyrażeniu założyliśmy, że $\hat{\mathbf{n}}$ leży w płaszczyźnie yz . Z jawnego quasistatycznego rozwiązania podstawowych równań wynika, że gęstość uzwojenia jest ciągnięta wzdłuż kierunku \mathbf{j} . Efekt ten można jakościowo odróżnić od efektów Fréedericksza wynikających z członu $-\Delta\epsilon(\hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{E})^2$ w energii swobodnej, który nie zależy od znaku \mathbf{j} . Z reakcji wstecznej dynamiki nematycznej na odpowiedź elektryczną wynika, że siła napędowa \mathcal{E} powoduje efektywną różnicę potencjałów elektrycznych między dwiema płytkami, która ma postać indukcyjną. Wynikowa impedancja jest dostępna eksperymentalnie i pokazuje, że defekty topologiczne w komórce nematycznej między dwiema elektrodami mogą przenosić indukcyjność dla niezerowych γ .

Jako drugi sposób pomiaru γ zaproponowaliśmy w artykule [A1] układ, w którym rdzeń dyslokacji $+1/2$ może być przemieszczany za pomocą prądu ładowania. Sytuacja ta różni się od znanych w literaturze przykładów, w których ruch defektu jest indukowany przez przepływ płynu [67]. W tej specyficznej geometrii znaleźliśmy analityczne wyrażenie na końcową prędkość dyslokacji i wykazaliśmy, że zależy ona liniowo od \mathbf{j} ze stałą proporcjonalności γ . W ten sposób badanie ruchu defektu dla zmiennych \mathbf{j} pozwala nam eksperymentalnie zmierzyć nieznaną wartość γ .

4. Podsumowanie

Podsumowując, pokazaliśmy kilka przykładów, w których podwójne warstwy elektryczne w anizotropowych płynach nematycznych odgrywają ważną rolę w sytuacjach równowagi i poza równowagą. W szczególności podkreśliliśmy, w jaki sposób tekstura nematyczna dyktuje przestrzenne profile ładunków jonowych wokół różnych konfiguracji kierujących, takich jak defekty topologiczne, oraz w jaki sposób rozkłady ładunków powierzchniowych zewnętrznych ścian i cząstek mogą być manipulowane przez teksturę nematyczną w kontakcie z tymi obiektami. Ponadto pokazaliśmy, w jaki sposób elektrostatyka może wpływać na powierzchniowe zakotwiczenie mezogenów i jak anizotropia dielektryczna ośrodka nematycznego wpływa na ekranowanie elektrostatyczne. W sytuacjach nierównowagowych podkreśliliśmy wzajemną naturę nematyczno-jonowych sprzężeń dyssypacyjnych, które prowadzą do nematycznego momentu obrotowego indukowanego przez prądy ładunkowe lub wzajemnego pompowania jonów poprzez ruch tekstury nematycznej.

Ze względu na pionierski charakter dotychczasowych badań, istnieje wiele możliwości ich rozszerzenia. Otrzymałem grant Sonata Bis z Narodowego Centrum Nauki na realizację nowych pomysłów w tym kierunku. W szczególności interesują mnie efekty wyższych stężeń jonów i pól elektrycznych poza przybliżeniem Poissona-Boltzmanna, gdzie efekty steryczne jon-jon i jon-mezogen odgrywają ważną rolę. W tym kontekście jestem szczególnie zainteresowany wykorzystaniem elektrolitów nematycznych w zastosowaniach związanych z magazynowaniem energii, takich jak dwuwarstwowe kondensatory elektryczne oparte na elektrolitach nematycznych. Ponadto planuję przeanalizować wpływ jonów w niedawno odkrytych ferroelektrykach nematycznych [68], które mogą mieć obiecujące zastosowania elektrooptyczne ze względu na ich dużą makroskopową polaryzację przy zachowaniu płynnej natury. Wreszcie, na poziomie sytuacji nierównowagowych, jestem zainteresowany rozszerzeniem wzajemnych sprzężeń nematyczno-jonowych, które wprowadziliśmy w naszej pracy, i zbadaniem ich interakcji z przepływem i aktywnością płynu.

W szerszym kontekście planuję poszerzyć swoje portfolio badawcze również o inne tematy. Zaczęłam podejmować kroki w tym kierunku, pracując nad chiralnymi płynami aktywnymi i ruchem Browna w układach wielociałowych. Jako dalekosiężny cel, jestem bardzo zainteresowany tym, w jaki sposób zjawiska omówione powyżej mogą być wykorzystane w tak zwanych obliczeniach neuromorficznych, które obejmują metody obliczeniowe inspirowane mózgiem, w których uważa się, że jony w miękkich materiałach mogą odgrywać ważną rolę [69, 70]. Ponadto planuję pójść w kierunku fizyki biologicznej, gdzie moim zdaniem jest obecnie wiele niezbadanych obszarów. Obecnie pracuję nad projektem kwantyfikacji wpływu nematycznie uporządkowanego naładowanego DNA w kapsydzie wirusa na efektywne oddziaływanie. Wreszcie, przewiduję pojawienie się wielu nowych ekscytujących zjawisk, gdy układy miękkiej materii są łączone z układami kwantowymi [71–73].

5 INFORMACJA O WYKAZYWANIU SIĘ ISTOTNĄ AKTYWNOŚCIĄ NAUKOWĄ ALBO ARTYSTYCZNĄ REALIZOWANĄ W WIĘCEJ NIŻ JEDNEJ UCZELNI, INSTYTUCJI NAUKOWEJ LUB INSTYTUCJI KULTURY, W SZCZEGÓLNOŚCI ZAGRANICZNEJ

Już na wczesnym etapie mojej kariery byłem zaangażowany w badania naukowe. Mój pierwszy projekt badawczy rozpoczął się podczas studiów licencjackich, kiedy zostałem zatrudniony jako młodszy badacz w Spinoza Institute na Eindhoven University of Technology. Instytut ten został założony przez prof. Berta Meijera, ale kierowany przez prof. Anję Palmans. W tym okresie pracowałem nad dwoma projektami związanymi z samoorganizacją supramolekularną, które doprowadziły do dwóch publikacji, do których wniosłem znaczący wkład. Głównymi obiektami badań były cząsteczki przypominające dyski (tzw. benzenotrikarboksamidy, BTA), o których wiadomo było, że samoorganizują się w długie spiralne włókna w rozcieńczonym roztworze. W normalnych warunkach, tj. gdy molekularne bloki budulcowe są achiralne, zarówno lewo-, jak i prawoskrętne helisy tworzą się w równych ilościach. Jednakże, gdy cząsteczki podobne do dysków są chiralne - co oznacza, że lustrzane odbicie trójwymiarowej struktury molekularnej nie może być nałożone na siebie - chiralność na poziomie molekularnym jest „przenoszona” na mezoskopowy poziom helisy i powstają tylko włókna o jednym typie skrętności. Moje główne zadania (pod codziennym nadzorem Maartena Smuldersa i Anji Palmans) polegały na syntezie i scharakteryzowaniu określonego typu BTA z inną łącznością amidową niż inne znane BTA w literaturze. Następnie przeanalizowałem tę cząsteczkę w rozcieńczonym roztworze po zmieszaniu z innymi rodzajami (a)chiralnych BTA i scharakteryzowałem ilość i rodzaj spiralnych włókien utworzonych w rozcieńczonym roztworze przy użyciu metod spektroskopowych. Później Patrick Stals przeanalizował również strukturę krystaliczną takich BTA, a Ivo Filot przeanalizował strukturę helis przy użyciu metod kwantowo-chemicznych. Później ta wspólna praca doprowadziła do publikacji w *Chemistry: A European Journal*.

W mojej pracy licencjackiej analizowałem eksperymentalnie inny typ BTA w podobny sposób (wraz z Sedą Cantekin i Yoko Nakano), gdzie chiralność została wprowadzona poprzez izotopową substytucję atomów wodoru deuterem. W przypadku takiej cząsteczki, która jest chiralna w „minimalny” sposób, odkryliśmy, że rozpuszczalnik odgrywa ważną rolę we właściwościach samoorganizacji, co jest rzadkością w przypadku takich układów. Na przykład rodzaj rozpuszczalnika może zmieniać nie tylko skrętność włókna helikalnego, ale także jego właściwości strukturalne. Ponadto współpracowałem z prof. Paulem van der Schootem nad teorią samoorganizacji takich struktur. Ostatecznie praca ta została opublikowana w *Chemical Communications*.

Po tych eksperymentalnych projektach, które koncentrowały się głównie na chemii, przeszedłem do obszaru fizyki teoretycznej. Podczas mojego projektu magisterskiego pracowałem pod nadzorem prof. Cristiane de Moraes Smith na Utrecht University nad realizacją izolatorów topologicznych w dwuwymiarowych sieciach. W ramach opisu ciasnego wiązania energia kinetyczna fermionów lub bozonów

zajmujących miejsca w sieci jest opisywana przez tzw. składowe hoppingowe w (efektywnym) hamiltonianie. Taki wkład wynika z nakładania się wybranych funkcji falowych, które są zlokalizowane w miejscach sieci. W normalnych warunkach parametr przeskoku najbliższego sąsiada t jest większy niż parametr przeskoku najbliższego sąsiada t' . Jednak w eksperymentach z zimnymi atomami w okresowo modulowanych sieciach optycznych można skutecznie uzyskać sytuację, w której $t' > t$. Używając t' jako regulowanego parametru, odkryliśmy wraz z Wouterem Beugelingiem, że możliwa jest zmiana liczby Cherna określonego pasma, pod warunkiem, że komórka elementarna sieci zawiera więcej niż dwa miejsca sieciowe. Ta liczba Cherna jest bezpośrednio związana z liczbą stanów przewodzących na granicy skończonej sieci - tak zwanych stanów brzegowych - biorąc pod uwagę, że wewnątrz układu jest izolatorem. Obserwacja, że dostrojenie t' może zmienić liczbę stanów brzegowych izolatora topologicznego doprowadziła do publikacji w Physical Review B.

Na studiach doktoranckich zmieniłem temat z twardej materii skondensowanej na miękką materię skondensowaną. W tym okresie pracowałem pod nadzorem prof. René van Roij na Uniwersytecie w Utrechcie nad fizyką naładowanych cząstek koloidalnych. Takie cząstki (o rozmiarach rzędu od kilku nanometrów do mikronów) są na tyle duże, że można je badać eksperymentalnie za pomocą mikroskopów optycznych, ale na tyle małe, że wywierają ruchy Browna. Gdy cząstki te wejdą w kontakt z rozpuszczalnikiem zawierającym jony, tworzy się podwójna warstwa elektryczna. Gdy rozpuszczalnikiem jest woda, długość Debye'a jest na ogół znacznie mniejsza niż rozmiar cząstki koloidalnej. w tym czasie grupa prof. Alfonsa van Blaaderena (z którym współpracowaliśmy), mogła również realizować naładowane cząstki koloidalne w rozpuszczalnikach oleistych. Rozpuszczalniki oleiste są mniej polarne niż woda, dlatego rozpuszczenie w nich jonów jest znacznie trudniejsze. W niektórych olejach można jednak rozpuścić niewielką liczbę jonów. W konsekwencji, elektryczne warstwy podwójne mogą mieć grubość rzędu lub nawet większą niż typowy rozmiar cząstki koloidalnej. Oddziaływania elektrostatyczne w takich zawiesinach koloidalnych odgrywają ważniejszą rolę niż w naładowanych koloidach na bazie wody ze względu na słabsze ekranowanie elektrostatyczne.

Zmotywowani tymi eksperymentami, wykorzystaliśmy metody typu Poissona-Boltzmanna do obliczenia równania stanu naładowanych koloidów, w których długość Debye'a i gęstość koloidu są traktowane jako parametry przestrajalne. We współpracy z Nielsem Boonem wykorzystaliśmy odpowiednie odwzorowanie zawiesiny w przybliżeniu kulistej komórki do jednoskładnikowej plazmy (co jest odpowiednie dla naładowanych koloidów z dużymi podwójnymi warstwami), aby uzyskać wiarygodne wyniki. Dzięki tej metodologii mogliśmy wyjaśnić ponowne topnienie naładowanych cząstek koloidalnych, w którym sekwencja cieczy \rightarrow sześciennych kryształów \rightarrow została znaleziona po zwiększeniu gęstości koloidu przy stałym stężeniu jonów. Stwierdziliśmy, że zasadniczym składnikiem takiego zachowania było to, że chemia powierzchni cząstek pozwalała na adsorpcję jonów dodatnich i ujemnych. Należy to skonstrastować z przypadkiem adsorpcji pojedynczego jonu, w którym nie występuje ponowne topnienie. Nasze wyniki zostały opublikowane w Physical Chemistry Chemical Physics. Ponadto, wykorzystując ponownie metody typu Poissona-Boltzmanna, byliśmy w stanie wyjaśnić powstawanie naprzemiennych łańcuchów i klastrów w mieszaninach jednakowo naładowanych cząstek koloidalnych (zaobserwowanych eksperymentalnie przez Marjolein van der Linden z grupy van Blaaderena) przy użyciu dokładnej analizy efektywnego potencjału oddziaływania między dwiema naładowanymi cząstkami koloidalnymi. Również w tym przypadku chemia powierzchni ma znaczenie, co umożliwiło tworzenie się plastrów o przeciwnym ładunku na powierzchni cząstek po zmniejszeniu średniej odległości między cząstkami, co doprowadziło do efektywnego przyciągania anizotropowego. Nasze wyniki opublikowaliśmy w czasopiśmie Soft Matter.

Druga część mojej pracy doktorskiej koncentrowała się na zachowaniu zdyspergowanych w oleju naładowanych cząstek koloidalnych w pobliżu interfejsów olej-woda. W literaturze często stwierdzano, że takie cząstki - po zaadsorbowaniu na granicy faz olej-woda - nie mogą zostać odłączone ze względu na energię oddziaływania zwilżającego, które są rzędu $\sim 10^6 k_B T$. Jednak eksperymenty przeprowadzone

przez Ninę Elbers i Jessi van der Hoeven w grupie prof. Alfonsa van Blaaderena wykazały, że można zrealizować układy, w których cząstki znajdują się blisko granicy faz olej-woda bez faktycznego przecinania tej granicy. Konkurencja między odpychającym oddziaływaniem van der Waalsa cząsteczka-olej-woda z ekranowanymi oddziaływaniami Coulomba ustabilizowała taką konfigurację. W takim przypadku cząstki mogą zostać oderwane od granicy faz olej-woda poprzez dodanie jonów do fazy olejowej. Teoretycznie modelowaliśmy takie scenariusze za pomocą Sela Samin, obliczając numerycznie efektywny potencjał oddziaływania między naładowaną kulistą cząstką a płaskim interfejsem olej-woda przy użyciu zmodyfikowanej teorii Poissona-Boltzmanna. Pokazaliśmy, w jaki sposób ten potencjał interakcji zależy od składu chemicznego powierzchni cząstki i ładunku interfejsu olej-woda. Dzięki temu modelowi teoretycznemu byliśmy w stanie wyjaśnić obserwacje eksperymentalne. Wywołane jonami oderwanie od interfejsu można następnie racjonalizować poprzez odwrócenie ładunku cząstki koloidalnej z dodatnio naładowanej na ujemnie naładowaną, która następnie oddziałuje z naładowanym interfejsem olej-woda, który nie jest naładowany. Efekt ten może stać się silniejszy niż interakcja obraz-ładunek między cząsteczką a interfejsem, która wynika z kontrastu dielektrycznego między cząsteczką, olejem i fazą wodną, co w typowym scenariuszu eksperymentalnym zawsze prowadzi do przyciągania. Praca ta zaowocowała artykułem teoretycznym w *Physical Review Letters* oraz artykułem z udziałem eksperymentatorów w *Physical Chemistry Chemical Physics* (ten ostatni został opublikowany po uzyskaniu przeze mnie stopnia doktora).

Oprócz mojej pracy nad naładowanymi koloidami, podczas studiów doktoranckich wniosłem również wkład w dziedzinę ciekłych kryształów, opracowując teorię Landaua-de Gennesa dla twardych prętów koloidalnych. Praca ta została wykonana wspólnie z Melle Punterem, Selą Samin, Paulem van der Schootem i René van Roijem. „Standardowe” teorie Landaua-de Gennesa są zwykle ukierunkowane na tak zwane termotropowe ciekłe kryształy, w których porządek nematyczny pojawia się po obniżeniu temperatury. Twarde pręty koloidalne tworzą jednak fazy ciekłokrystaliczne po zwiększeniu gęstości cząstek, a przejściu fazowemu towarzyszy skok gęstości. Zaproponowaliśmy dokładny sposób uwzględnienia takiego skoku gęstości poprzez wykorzystanie potencjału chemicznego jako parametru kontrolnego zamiast temperatury. Ponadto pokazaliśmy, jak ta metodologia działa w określonych sytuacjach, takich jak rozmiar defektu topologicznego, ciekłe kryształy w zamknięciu i tworzenie kropelek ciekłokrystalicznych (tak zwanych taktoidów).

Podczas studiów doktoranckich koncentrowałem się głównie na scenariuszach równowagowych, w których zaangażowane są podwójne warstwy elektryczne. Jednak w późniejszych latach pracowałem również z prof. René van Roijem nad sytuacjami nierównowagowymi. W szczególności przyczyniłem się do rozszerzenia efektów chemii powierzchni na sytuacje nierównowagowe przy użyciu równań elektrokinetycznych z odpowiednimi warunkami brzegowymi. Korzystając z tej metodologii, Ben Werkhoven wykazał następnie, że przepływ płynu może wpływać na rozkład gęstości ładunku powierzchniowego ściany adsorbującej jony. Odkrycia te zostały opublikowane w *Physical Review Letters*. Efekty nierównowagowe były również kluczowe w sedymentacji dwuskładnikowej mieszaniny jednakowo naładowanych cząstek koloidalnych. Tutaj, wykorzystując prostą efektywną dynamikę, znaleźliśmy ilościową zgodność z eksperymentem dla stacjonarnych profili gęstości różnych typów cząstek koloidalnych. Ponadto udało nam się wyjaśnić występowanie tak zwanego efektu orzecha brazylijskiego, w którym cięższe cząstki „unoszą się” na lżejszych cząstkach. Sytuacja równowagi jest określona przez stosunek ładunku dwóch rodzajów cząstek w porównaniu do stosunku ich mas wyporu. Za pomocą metod teoretycznych wykazaliśmy, że obserwowana eksperymentalnie ogólna zależność tego zjawiska od gęstości (eksperymenty przeprowadzone przez Marjolein van der Linden) okazuje się być kwestią tego, czy sytuacja równowagi została osiągnięta, czy nie. Wyjaśnienie i obserwację tego koloidalnego efektu orzecha brazylijskiego opublikowaliśmy w *Proceedings of the National Academy of Sciences U.S.A.*

Podczas mojego pierwszego stażu podoktorskiego na Uniwersytecie w Lublanie, w Słowenii, początkowo kontynuowałem pracę nad naładowanymi koloidami. W szczególności współpracowałem

z prof. Miha Ravnikiem nad strukturą podwójnych warstw w ramach teorii Poissona-Boltzmana dla bardziej skomplikowanych kształtów cząstek niż kule. W szczególności interesowały nas topologiczne kształty powierzchni o stałej gęstości ładunku, gdy cząstka ma nietrywialną topologię. Przeanalizowaliśmy topologiczne właściwości takich izopowierzchni w funkcji długości Debye'a. Praca ta została opublikowana w czasopiśmie Scientific Reports. Później zbadano wpływ kształtu elektrycznych warstw podwójnych na efektywny potencjał pary między dwiema cząstkami. Na podstawie tego pomysłu opracowałem wydajną przybliżoną metodę analitycznego obliczania potencjału oddziaływania między dwiema cząstkami dla dowolnych separacji i orientacji cząstek, wykorzystując odpowiednie odwzorowanie cząstki na osobliwy rozkład ładunku. Praca ta doprowadziła do publikacji jednoautorskiej w Physical Review Research i stanowiła podstawę metod analitycznych zastosowanych w pracy Ref. [A3].

Na drugim stażu podoktorskim, u prof. Roberta Hołysta w Instytucie Chemii Fizycznej PAN w Warszawie, pracowałem nad samodyfuzją kulistej cząstki sondy w złożonej cieczy składającej się z cząstek stłoczonych. Obecnie wraz z Karolem Makuchem przygotowujemy manuskrypty dotyczące naszych wyników. W szczególności byliśmy zainteresowani uzyskaniem analitycznego wyrażenia na stałą dyfuzji w funkcji rozmiaru cząstki znacznika dla danego potencjału oddziaływania między cząstą znacznika a cząstkami tłumiącymi. Jest to bardzo złożony problem, ponieważ trzeba pominąć rzędy wielkości w skalach długości przy użyciu metod teoretycznych. Naszym najważniejszym wynikiem jest to, że pokazaliśmy, że stosunek stałej dyfuzji własnej w długim czasie do stałej dyfuzji pojedynczej cząstki, D/D_0 , nie zbliża się do jedności dla granicy cząstki punktowej. Jest to jednak często zakładane w literaturze przy konstruowaniu wzorów empirycznych. W tym przypadku granica punktowa powinna być rozumiana jako sytuacja, w której rozmiar cząstki znacznika jest znacznie mniejszy niż rozmiar zatłoczenia, ale nadal większy niż cząsteczka rozpuszczalnika. Zamiast tego, D/D_0 osiąga wartość, która zależy od rodzaju potencjału oddziaływania zatłoczenie-cząstka znacznika, który można obliczyć w sposób jawny. Ta fizyczna granica stanowi solidną podstawę do konstruowania wyrażeń empirycznych opisujących dane eksperymentalne dla wszystkich rozmiarów cząstek znacznika. Manuskrypty są obecnie w przygotowaniu, ponieważ czekamy na nowe wyniki eksperymentalne i analizy danych, które powinny zostać zmodyfikowane o te najnowsze spostrzeżenia. Uważam jednak za właściwie zamieszczenie tu podsumowania tych badań, mimo że nie opublikowaliśmy jeszcze prac na ten temat, biorąc pod uwagę ilość czasu spędzonego w Instytucie Chemii Fizycznej jako badacz podoktorski.

Kiedy przenieśliśmy się na Uniwersytet Warszawski, pracowałem z prof. Bogdanem Cichockim nad nieściśliwymi trójwymiarowymi chiralnymi płynami aktywnymi. Takie płyny, podobnie jak ciekłe kryształy, są z natury anizotropowe. Jednak główna różnica w stosunku do ciekłych kryształów polega na tym, że anizotropia wynika z samowirujących cząstek poddanych aktywnym momentom obrotowym. W związku z tym parametr porządku - wewnętrzna gęstość momentu pędu - jest nieparzysty przy odwróceniu czasu, w przeciwieństwie do nematycznego direktora, który jest niezmienny przy odwróceniu czasu. W związku z tym tensor lepkości takiego płynu ma bogatszą strukturę niż „zwykłe” płyny z powodu niezanikania części antysymetrycznej, znanej również jako lepkość nieparzysty. Dla uproszczonego modelu, w którym występuje tylko jedno ścinanie i jedna lepkość nieparzysty, obliczyliśmy dokładną funkcję Greena dla takiego płynu w reżimie przepływu pełzającego. Ponadto rozwiązaliśmy problem pojedynczej cząstki dla kuli podlegającej ruchowi ciała stałego z warunkami brzegowymi przylegania w liniowym przepływie otoczenia. W szczególności, analitycznie obliczyliśmy pełną macierz ruchliwości dla takiego układu i przeanalizowaliśmy konsekwencje, takie jak efektywny tensor lepkości zawiesziny pasywnych cząstek zanurzonych w lepkim płynie. Praca ta została niedawno opublikowana w Physical Review Letters.

6 INFORMACJA O OSIĄGNIĘCIACH DYDAKTYCZNYCH, ORGANIZACYJNYCH ORAZ POPULARYZUJĄCYCH NAUKĘ LUB SZTUKE

A. DOŚWIADCZENIE W NAUCZANIU

- Asystent dydaktyczny jako student studiów magisterskich na Utrecht University w ramach kursu Advanced Statistical Physics (2011).
- Asystent dydaktyczny jako doktorant na Utrecht University na kursach Statistical Field Theory (2012), Quantum Field Theory (2013) oraz Relativistic and Classical Mechanics (2014).
- Prowadzenie zajęć z przedmiotu Fizyka Statystyczna A na Uniwersytecie Warszawskim w roku akademickim 2023-2024 (pierwszy rok, studia magisterskie).
- Wykłady i ćwiczenia dla przedmiotu Zagadnienia współczesnej fizyki statystycznej na Uniwersytecie Warszawskim w roku akademickim 2023-2024 (pierwszy rok, studia magisterskie). Do tego kursu przygotowałem własne notatki z wykładów i ćwiczeń. Temat koncentrował się na zastosowaniu mechaniki statystycznej do miękkiej materii skondensowanej i biofizyki.
- Obecnie jestem promotorem pracy magisterskiej studentki (Laura Meissner) na Uniwersytecie Warszawskim. Projekt koncentruje się na analitycznym rozwiązaniu problemu pojedynczej kuli w przepływie pełzającym dla ogólnych tensorów lepkości.

B. DZIAŁALNOŚĆ ORGANIZACYJNA

- Odpowiedzialność za ocenę programu magisterskiego Fizyka teoretyczna, Utrecht University (2011-2012).
- Członek komitetu doradczego ds. edukacji na Wydziale Fizyki Utrecht University (2011-2012)
- Skoordynowanie i podzielenie zadań edukacyjnych dla programu magisterskiego Fizyka teoretyczna, Utrecht University (2014-2016)

C. POPULARYZACJA NAUKI

- Nadzór nad projektem dla uczniów szkół średnich dotyczącym syntezy i charakteryzacji materiałów ciekłokrystalicznych w latach 2008, 2009 i 2010 na Eindhoven University of Technology.
- Opracowanie materiałów do nauki dla szkoły podstawowej („De Hovenier”, Montfort, Niderlandy). Celem było zapoznanie uczniów szkół podstawowych w młodym wieku z nauką i technologią.
- Organizator seminarium PLaneT „PhD Lunch and non-expert Talk”, Utrecht University (2015-2016).
- Udział w Europejskiej Nocy Naukowców w Lublanie w celu popularyzacji nauki (2019).
- Udział w wydarzeniu „Physics in Ljubljana” (2023), wydarzeniu popularyzującym badania naukowe wśród studentów studiów licencjackich. Przyniłem się do tego, wygłaszając wykład na temat ruchów Browna w złożonych cieczach.
- Publikacja na temat efektu orzecha brazylijskiego w naładowanych koloidach miała kilka publikacji prasowych:

– Defying gravity: <https://en.uw.edu.pl/defying-gravity/>.

- First ever observation of Brazil nut effect for colloidal particles:
<https://www.uu.nl/en/news/first-ever-observation-of-brazil-nut-effect-for-colloidal-particles> .

7 INNE INFORMACJE ZAWODOWE

- Nagroda „Młodzi Naukowcy IChF PAN (2020)” przyznana przez Instytut Chemii Fizycznej, Warszawa, Polska, na podstawie listy publikacji jako pierwszy lub korespondujący autor z afiliacją IChF PAN.
- Indywidualne stypendium w ramach programu „Inicjatywa Doskonałości - Uczelnia Badawcza”, 2022-2024, Instytut Studiów Zaawansowanych, Warszawa.
- Nagroda dla Wybitnego Młodego Naukowca od Ministerstwa Edukacji i Nauki (2022), Polska - najbardziej prestiżowe stypendium dla naukowców poniżej 35 roku życia w Polsce.
- Nagroda za plakat (pierwsze miejsce) na Dniu Wydziałów (2015) Uniwersytetu w Utrechcie, Holandia. Przyznana za prezentację plakatu naukowego o wyjątkowej treści i przeprowadzonego z doskonałą przejrzystością.

Literatura

- [1] P.-G. De Gennes and J. Prost, *The physics of liquid crystals*, Vol. 83 (Oxford University Press, 1993).
- [2] J. L. Ericksen, *Trans. Soc. Rheol.* **5**, 23 (1961).
- [3] F. M. Leslie, *Arch. Ration. Mech. Anal.* **28**, 265 (1968).
- [4] O. Parodi, *J. Phys. France* **31**, 581 (1970).
- [5] C. W. Oseen, *Trans. Faraday Soc.* **29**, 883 (1933).
- [6] F. C. Frank, *Discuss. Faraday Soc.* **25**, 19 (1958).
- [7] E. Frezza, A. Ferrarini, H. B. Kolli, A. Giacometti, and G. Cinacchi, *J. Chem. Phys.* **138**, 164906 (2013).
- [8] M. Chiappini, T. Drwenski, R. van Roij, and M. Dijkstra, *Phys. Rev. Lett.* **123**, 068001 (2019).
- [9] T. Kato, J. Uchida, T. Ichikawa, and T. Sakamoto, *Angew. Chem. Int. Ed* **57**, 4355 (2018).
- [10] S. T. L. K. Skarp and B. Stebler, *Mol. Cryst. Liq. Cryst.* **60**, 215 (1980).
- [11] R. Oldenbourg, X. Wen, R. B. Meyer, and D. L. D. Caspar, *Phys. Rev. Lett.* **61**, 1851 (1988).
- [12] Y. I. Yaman, E. Demir, R. Vetter, and A. Kocabas, *Nat. Commun.* **10**, 2285 (2019).
- [13] K. Kočevár and I. Muševič, *Phys. Rev. E* **64**, 051711 (2001).
- [14] R. R. Shah and N. L. Abbott, *Langmuir* **19**, 275 (2003).
- [15] M. Raicopol, C. Dascalu, R. Atasiei, and A. T. Ionescu, *J. Appl. Phys* **109**, 124905 (2011).
- [16] D. C. Grahame, *Chem. Rev.* **41**, 441 (1947).
- [17] C. Valeriani, P. J. Camp, J. W. Zwanikken, R. van Roij, and M. Dijkstra, *Soft Matter* **6**, 2793 (2010).
- [18] J.-P. Hansen and I. R. McDonald, *Theory of simple liquids* (Elsevier, 1990).
- [19] V. Fréedericksz and A. Repiewa, *Z. Phys.* **42**, 532 (1927).
- [20] M. Schadt, *Annu. Rev. Mater. Res.* **27**, 305 (1997).
- [21] R. B. Meyer, *Phys. Rev. Lett.* **22**, 918 (1969).
- [22] A. Alexe-Ionescu, *Phys. Lett. A* **180**, 456 (1993).
- [23] M. Gros, S. Gromb, and C. Gavach, *J. Electroanal. Chem* **89**, 29 (1978).
- [24] T. Kakiuchi, *Anal. Chem.* **68**, 3658 (1996).
- [25] H. Jensen, V. Devaud, J. Jossierand, and H. H. Girault, *J. Electroanal. Chem* **537**, 77 (2002).
- [26] P. Debye and K. Kleboth, *J. Chem. Phys.* **42**, 3155 (1965).
- [27] A. Onuki, *Phys. Rev. E* **73**, 021506 (2006).
- [28] S. Samin and Y. Tsori, *J. Chem. Phys.* **136**, 154908 (2012).
- [29] M. Bier, A. Gambassi, and S. Dietrich, *J. Chem. Phys.* **137**, 034504 (2012).

- [30] J. D. Jackson, *Classical electrodynamics* (John Wiley & Sons, 2021).
- [31] S. R. De Groot and P. Mazur, *Non-equilibrium thermodynamics* (Courier Corporation, 2013).
- [32] O. D. Lavrentovich, I. Lazo, and O. P. Pishnyak, *Nature* **467**, 947 (2010).
- [33] M. Rajabi, T. Turiv, B.-X. Li, H. Baza, D. Golovaty, and O. D. Lavrentovich, *Phys. Rev. Lett.* **132**, 158102 (2024).
- [34] P. Salamon, N. Éber, A. Krekhov, and A. Buka, *Phys. Rev. E* **87**, 032505 (2013).
- [35] L. Onsager, *Phys. Rev.* **37**, 405 (1931).
- [36] O. M. Tovkach, C. Conklin, M. C. Calderer, D. Golovaty, O. D. Lavrentovich, J. Viñals, and N. J. Walkington, *Phys. Rev. Fluids* **2**, 053302 (2017).
- [37] M. Z. Bazant, K. Thornton, and A. Ajdari, *Phys. Rev. E* **70**, 021506 (2004).
- [38] B. Jerome, *Rep. Prog. Phys.* **54**, 391 (1991).
- [39] G. P. Crawford, R. Ondris-Crawford, S. Žumer, and J. W. Doane, *Phys. Rev. Lett.* **70**, 1838 (1993).
- [40] H. Stark, *Phys. Rep.* **351**, 387 (2001).
- [41] J. Patel and H. Yokoyama, *Nature* **362**, 525 (1993).
- [42] M. K. McCamley, G. P. Crawford, M. Ravnik, S. Žumer, A. W. Arntstein, and S. M. Opal, *App. Phys. Lett.* **91**, 141916 (2007).
- [43] V. M. O. Batista, M. L. Blow, and M. M. Telo da Gama, *Soft Matter* **11**, 4674 (2015).
- [44] A. Rapini and M. Papoular, *J. Phys. Colloques* **30**, C4 (1969).
- [45] B. W. Ninham and V. Parsegian, *J. Theor. Biol.* **31**, 405 (1971).
- [46] D. G. Rowan, J.-P. Hansen, and E. Trizac, *Mol. Phys.* **98**, 1369 (2000).
- [47] E. Trizac, L. Bocquet, R. Agra, J.-J. Weis, and M. Aubouy, *J. Phys.: Cond. Matt.* **14**, 9339 (2002).
- [48] C. Álvarez and G. Téllez, *J. Chem. Phys.* **133**, 144908 (2010).
- [49] J. C. Everts, *Phys. Rev. Res.* **2**, 033144 (2020).
- [50] B. Derjaguin and L. Landau, *Acta Physicochim. URSS* **14**, 633 (1941).
- [51] E. J. W. Verwey and J. T. G. Overbeek, in *Theory of the Stability of Lyophobic Colloids* (Elsevier, New York, 1948).
- [52] N. D. Mermin, *Rev. Mod. Phys.* **51**, 591 (1979).
- [53] G. P. Alexander, B. G.-g. Chen, E. A. Matsumoto, and R. D. Kamien, *Rev. Mod. Phys.* **84**, 497 (2012).
- [54] J. J. Sandford O’Neill, P. S. Salter, M. J. Booth, S. J. Elston, and S. M. Morris, *Nat. Commun.* **11**, 2203 (2020).
- [55] A. A. Verhoeff, R. H. J. Otten, P. van der Schoot, and H. N. W. Lekkerkerker, *J. Chem. Phys.* **134**, 044904 (2011).
- [56] M. Nikkhou, M. Škarabot, S. Čopar, M. Ravnik, S. Žumer, and I. Muševič, *Nat. Phys.* **11**, 183 (2015).
- [57] S. Čopar, Ž. Kos, T. Emeršič, and U. Tkalec, *Nat. Commun.* **11**, 59 (2020).
- [58] B.-X. Li, V. Borshch, R.-L. Xiao, S. Paladugu, T. Turiv, S. V. Shiyankovskii, and O. D. Lavrentovich, *Nat. Commun* **9**, 1 (2018).
- [59] J. Pollard, G. Posnjak, S. Čopar, I. Muševič, and G. P. Alexander, *Phys. Rev. X* **9**, 021004 (2019).
- [60] I. I. Smalyukh, *Rep. Prog. Phys* **83**, 106601 (2020).
- [61] A. Yethiraj and A. van Blaaderen, *Nature* **421**, 513 (2003).
- [62] M. Westbroek, N. Boon, and R. van Roij, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **17**, 25100 (2015).
- [63] N. Schopohl and T. Sluckin, *J. Phys. France* **49**, 1097 (1988).
- [64] N. Schopohl and T. J. Sluckin, *Phys. Rev. Lett.* **59**, 2582 (1987).
- [65] S. A. Wolf, D. D. Awschalom, R. A. Buhrman, J. M. Daughton, S. von Molnár, M. L. Roukes, A. Y. Chtchelkanova, and D. M. Treger, *Science* **294**, 1488 (2001).
- [66] G. Müller and J. Senior, *J. Hydraul. Res.* **47**, 666 (2009).
- [67] X. Tang and J. V. Selinger, *Soft Matter* **15**, 587 (2019).
- [68] X. Chen, E. Korblova, D. Dong, X. Wei, R. Shao, L. Radzihovsky, M. A. Glaser, J. E. MacLennan, D. Bedrov, D. M. Walba, and N. A. Clark, *Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A.* **117**, 14021 (2020).
- [69] M. U. Khan, J. Kim, M. Y. Chougale, R. A. Shaikat, Q. M. Saqib, S. R. Patil, B. Mohammad, and J. Bae, *Adv. Intell. Syst.* **5**, 2200281 (2023).

- [70] S. Dai, X. Liu, Y. Liu, Y. Xu, J. Zhang, Y. Wu, P. Cheng, L. Xiong, and J. Huang, *Adv. Mater.* **35**, 2300329 (2023).
- [71] N. Kavokine, M.-L. Bocquet, and L. Bocquet, *Nature* **602**, 84 (2022).
- [72] R. P. Thedford, F. Yu, W. R. T. Tait, K. Shastri, F. Monticone, and U. Wiesner, *Adv. Mat.* **35**, 2203908 (2023).
- [73] V. Sultanov, A. Kavčič, E. Kokkinakis, N. Sebastián, M. V. Chekhova, and M. Humar, *Nature* **631**, 294 (2024).