



Universiteit
Leiden
The Netherlands

On the geometry of fracture and frustration

Koning, V.

Citation

Koning, V. (2014, November 26). *On the geometry of fracture and frustration. Casimir PhD Series*. Retrieved from <https://hdl.handle.net/1887/29873>

Version: Not Applicable (or Unknown)

License: [Leiden University Non-exclusive license](#)

Downloaded from: <https://hdl.handle.net/1887/29873>

Note: To cite this publication please use the final published version (if applicable).

Cover Page



Universiteit Leiden



The handle <http://hdl.handle.net/1887/29873> holds various files of this Leiden University dissertation.

Author: Koning, Vinzenz

Title: On the geometry of fracture and frustration

Issue Date: 2014-11-26

SAMENVATTING

Dit proefschrift gaat over geometrische frustratie. Geometrische frustratie treedt op wanneer lokale orde niet door de gehele ruimte kan worden gehandhaafd. Een vaak voorkomend gevolg zijn defecten. Een vertrouwd voorbeeld van dit verschijnsel is de voetbal. Het oppervlak van de voetbal is zowel bedekt met zeshoeken, traditioneel wit gekleurd, en vijfhoeken, doorgaans zwart. Een betegeling van zeshoeken - een voorbeeld van orde - is onmogelijk op een boloppervlak - de ruimte - en andere veelhoeken - de defecten - zijn noodzakelijk. Een ander voorbeeld zijn de breedtecirkels op de aarde, die tot een punt krimpen bij de noord- en zuidpool. Die twee punten vormen de defecten en hebben elk een windingsgetal van 1. De totale som van het windingsgetal wordt bepaald door de topologie van het oppervlak.



Figuur 68: Twee vertrouwde voorbeelden van geometrische frustratie.

Links: Geometrische frustratie in een voetbal. Een perfecte betegeling van witte zeshoeken is onmogelijk, resulterend in twaalf zwarte vijfhoeken (de defecten). *Rechts:* Geometrische frustratie op de aardbol. De breedtecirkels krimpen tot een punt bij de noord- en zuidpool (defecten). Aangepast van ref. [1].

Geometrische frustratie treedt ook op in materialen, bijvoorbeeld vloeibare kristallen. In een nematisch vloeibaar kristal wijzen de staafvormige moleculen in eenzelfde richting, \mathbf{n} . Die richting

wordt de director genoemd. Idealiter wijst \mathbf{n} overal dezelfde kant op. Echter, dit is soms onmogelijk als het nematisch vloeibaar kristal in een bepaalde geometrie wordt opgesloten. Zoals de naam al suggereert, is een nematisch vloeibaar kristal niet alleen geordend, maar ook vloeibaar en dus kunnen druppels van nematisch vloeibaar kristal gecreëerd worden. Ook nematische bolschillen kunnen gemaakt worden door een druppel water in te kapselen door een grotere druppel van nematisch vloeibaar kristal. De randvoorwaarden zijn zodanig dat de director zich parallel aan de grensoppervlakken wil richten.

In deel I kijken we naar de verschillende schikkingen van defecten in zulke nematische bolschillen. Dit is interessant, omdat defecten deze druppels een valentie kunnen geven en zo wellicht nieuwe structuren en materialen kunnen worden ontworpen. De defecten vormen aparte plekken op de bol, die in potentie gebruikt kunnen worden om gerichte verbindingen te bewerkstelligen, zoals dat in de natuur op atomaire schaal gebeurt. Een van de mogelijke director veldlijnen is als de breedtecirkels, dus met twee defecten. Soortgelijke bipolaire systemen zijn al via de defecten tot een ketting aaneengeregen. Aangezien er geen onderscheid is te maken tussen \mathbf{n} en $-\mathbf{n}$, zijn defecten met een half windingsgetal ook mogelijk. In eenzelfde emulsie kunnen zowel bolschillen met een valentie van twee, drie en vier voorkomen, zodanig dat het totale windingsgetal twee bedraagt.

In hoofdstuk 2 berekenen we de energetisch meest optimale positionering van de drie afstotende defecten: dit is een gelijkbenige driehoek. De trivalente dunne bolschil is energetisch onvoordeliger dan de tetravalente dunne bolschil. De trivalente toestand is echter toch stabiel in bolschillen met een eindige dikte, door een zogenaamde ‘ontsnapping in de derde dimensie’ van de director veldlijnen. We berekenen deze energetische barriere en de robuustheid tegen thermische fluctuaties.

In hoofdstuk 3 concentreren we ons op de divalente bolschil. Als het gevolg van een dichtheidsverschil tussen water en het nematisch vloeibaar kristal wordt de binnenste druppel naar boven verplaatst en is de dikte van de nematische bolschil inhomogeen. De dikte en de inhomogeniteit van de dikte van de schil beïnvloeden de locatie van de defecten. We onderscheiden twee toestanden. In één van de twee toestanden zitten de defecten gevangen in het

dunste halfrond, terwijl in de andere toestand de defecten zich juist zo ver mogelijk van elkaar vandaan bevinden. We vinden dat er zowel continue als abrupte overgangen kunnen plaatsvinden tussen deze twee toestanden als de dikte van de bolschil en diens inhomogeniteit veranderen.

In hoofdstuk 4 (deel II) beschouwen we nematische druppels in de vorm van een torus in plaats van een bol. De druppel kan deze ongebruikelijke vorm behouden door speciale eigenschappen van het dispersiemiddel. De topologie van het grensoppervlak vereist geen defecten. We ontdekken echter wel een twist in het directorveld ten gevolge van de opsluiting van het nematisch vloeibaar kristal in deze vorm boven een kritische waarde van de dikte van de torus. Dit directorveld is bovendien chiraal. Er zijn twee energetische minima die elkaanders spiegelbeeld zijn. Deze spontane chiraliteit wordt verklaard door twee elastische effecten. Ten eerste is twist voordeliger dan buiging van de director. Ten tweede ontdekten we dat een andere elastische vervorming, namelijk een elastische vervorming op de rand genaamd zadelspreiding, de director koppelt aan de excentrieke kromming van het grensvlak en daarmee bijdraagt aan een chirale toestand mits de corresponderende elastische constante positief is. Een extern veld breekt de spiegelsymmetrie niet expliciet, maar verschuift de kritische waarde van de dikte waarop de overgang plaatsvindt tussen de chirale and symmetrische toestand. Een moleculaire chiraliteit breekt de symmetrie wel expliciet.

In deel III beschouwen we de invloed van geometrische frustratie op scheurgroei. Als een elastische film wordt geforceerd een bepaalde vorm aan te nemen, zoals bijvoorbeeld een (Gaussische) bult, dan leidt de kromming van de film tot rek in het materiaal. Deze spanning heeft effect op de scheurgroei. Rondom de scheurtip is er een verhoogde spanning, die gekarakteriseerd wordt door twee spanningsintensiteitsfactoren. Als de spanningsintensiteitsfactor in de richting van maximale trekspanning boven een kritische waarde, de scheurgroeiweerstand, uitkomt begint de scheur te groeien, met mogelijk gevolg dat het materiaal breekt. De richting van scheurgroei hangt ook van de twee spanningsintensiteitsfactoren af. Aangezien de spanningsintensiteitsfactoren toenemen met de lengte van de scheur, is er een kritische lengte waarop de scheur begint met groeien. In hoofdstuk 5 berekenen we die kritische lengte voor

scheuren in gekromde platen. Deze lengte is een functie van de locatie en oriëntatie van de scheur. Voor scheuren in de richting van de azimut leidt de kromming tot een verlaging van de kritische lengte ongeacht de locatie. Voor radieel (ten opzichte van de bump) georiënteerde scheuren leidt de kromming ook tot een verlaging van de kritische lengte als de scheur zich binnen een bepaalde straal tot de top van de bump begeeft, maar een verhoging van de kritische lengte als de scheur zich daarbuiten bevindt. De grootte van de straal is grofweg de breedte van de bump. Ook de hoek tussen de oriëntatie van de scheur en de richting waarin deze groeit is afhankelijk van de locatie en oriëntatie van de scheur. In hoofdstuk 6 berekenen we numeriek het gehele pad dat een aanvankelijk rechte semi-oneindige scheur aflegt. Dit doen we met behulp van storingsrekening voor licht gekromde scheuren ontwikkeld door Cotterell en Rice. Deze afbuiging is het grootst als de scheur aankomt ter hoogte van de breedte van de bump.