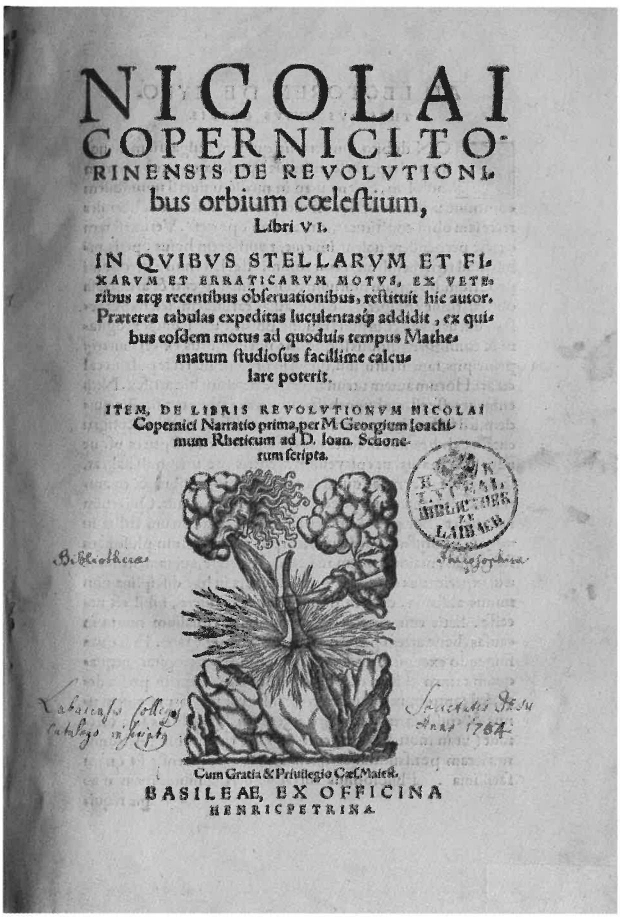
IZDAJA DRUŠTVO MATEMATIKOV, FIZIKOV IN ASTRONOMOV SLOVENIJE

ISSN 0473–7466

2006
Letnik 53
3

OBZORNIK ZA MATEMATIKO IN FIZIKO



NICOLAI COPERNICI TORINENSIS DE REVOLVTIONIbus orbium cœlestium, Libri VI.

IN QVIBVS STELLARVM ET FIXARVM ET ERRATICARVM MOTVS, EX VETEribus atq; recentibus obseruationibus, restituit hic autor. Præterea tabulas expeditas luculentasq; addidit, ex quibus eosdem motus ad quoduis tempus Mathematum studiosus facillime calculare poterit.

ITEM, DE LIBRIS REVOLVTIONVM NICOLAI Copernici Narratio prima, per M. Georgium Ioachimum Rheticum ad D. Ioan. Schonerum scripta.

Cum Gratia & Priuilegio Cæs. Maiest.

BASILEAE, EX OFFICINA HENRICPETRINA.

OBZORNIK ZA MATEMATIKO IN FIZIKO

Glasilo Društva matematikov, fizikov in astronomov Slovenije
Ljubljana, MAJ 2006, letnik 53, številka 3, strani 65–96

Naslov uredništva: DMFA–založništvo, Jadranska ulica 19, p. p. 2964, 1001 Ljubljana **Telefon:** (01) 4766 553, 4232 460, 2512 005 **Telefaks:** (01) 2517 281 **Elektronska pošta:** Zaloznistvo@dmfa.si **Internet:** http://www.obzornik.si/ **Transakcijski račun:** 03100–1000018787 **Devizna nakazila:** SKB banka d.d., Ajdovščina 4, 1513 Ljubljana **SWIFT (BIC):** SKBASI2X **IBAN:** SI56 0310 0100 0018 787

Jezikovno pregledal Janez Juvan, računalniško stavila Monika Testen.
Natisnila Tiskarna RAZVEDRILO v nakladi 1350 izvodov.

Člani društva prejemajo Obzornik brezplačno. Celoletna članarina znaša 5.000 SIT, za druge družinske člane in študente pa 2.500 SIT. Naročnina za ustanove je 8.000 SIT, za tujino 30 EUR. Posamezna številka za člane stane 1.000 SIT, stare številke 520 SIT.

DMFA je včlanjeno v Evropsko matematično društvo (EMS), v Mednarodno matematično unijo (IMU), v Evropsko fizikalno društvo (EPS) in v Mednarodno združenje za čisto in uporabno fiziko (IUPAP). DMFA ima pogodbo o recipročnosti z Ameriškim matematičnim društvom (AMS).

Revija izhaja praviloma vsak drugi mesec. Sofinancirata jo Javna agencija za raziskovalno dejavnost Republike Slovenije ter Ministrstvo za šolstvo in šport.

Poštnina plačana pri pošti 1102 Ljubljana

NAVODILA SODELAVCEM OBZORNIKA ZA ODDAJO PRISPEVKOV

Revija Obzornik za matematiko in fiziko objavlja izvirne znanstvene in strokovne članke iz matematike, fizike in astronomije, včasih tudi kak prevod. Poleg člankov objavlja prikaze novih knjig s teh področij, poročila o dejavnosti Društva matematikov, fizikov in astronomov Slovenije ter vesti o drugih pomembnih dogodkih v okviru omenjenih znanstvenih ved. Prispevki naj bodo zanimivi in razumljivi širšemu krogu bralcev, diplomantov iz omenjenih strok.

Članek naj vsebuje naslov, ime avtorja (oz. avtorjev), sedež institucije, kjer avtor(ji) dela(jo), izvleček v slovenskem jeziku, naslov in izvleček v angleškem jeziku, klasifikacijo (MSC oziroma PACS) in citirano literaturo. Slike in tabele, ki naj bodo oštevilčene, morajo imeti dovolj izčrpen opis, da jih lahko večinoma razumemo tudi ločeno od besedila. Avtorji člankov, ki želijo objaviti slike iz drugih virov, si morajo za to sami priskrbeti dovoljenje (copyright). Prispevki so lahko oddani v računalniški datoteki PDF ali pa natisnjeni enostransko na belem papirju formata A4. Zaželena velikost črk je 12 pt, razmik med vrsticami pa vsaj 18 pt.

Prispevke pošljite odgovornemu uredniku ali uredniku za matematiko oziroma fiziko na zgoraj napisani naslov uredništva. Vsak članek se praviloma pošlje dvema anonimnima recenzentoma, ki morata predvsem natančno oceniti, kako je obravnavana tema predstavljena, manj pomembna pa je originalnost (in pri matematičnih člankih splošnost) rezultatov. Če je prispevek sprejet v objavo, potem urednik prosi avtorja še za izvorne računalniške datoteke. Le-te naj bodo praviloma napisane v eni od standardnih različic urejevalnikov TeX oziroma LaTeX, kar bo olajšalo uredniški postopek.

Avtor se z oddajo članka strinja tudi z njegovo kasnejšo objavo v elektronski obliki na internetu.

O ODVISNIH ELEMENTIH NA KOLOBARJIH

IRENA KOSI–ULBL

Pedagoška fakulteta
Univerza v Mariboru

Math. Subj. Class. (2000): 16E99, 13N15, 08A35

Naj bo K asociativen kolobar. Element $a \in K$ je odvisen od preslikave $F: K \to K$, če za vsak $x \in K$ velja $F(x)a = ax$. V članku je dokazanih več rezultatov v zvezi z elementi, odvisnimi od preslikav, ki so povezane z odvajanji ali avtomorfizmi na prakolobarjih in polprakolobarjih.

ON DEPENDENT ELEMENTS IN RINGS

Let R be an associative ring. An element $a \in R$ is said to be dependent on a mapping $F: R \to R$ in case $F(x)a = ax$ holds for all $x \in R$. In this paper elements dependent on certain mappings connected to derivations or automorphisms on prime and semiprime rings are investigated.

V članku bomo s K označevali asociativen kolobar s centrom $Z(K)$. Kolobar K je *brez elementov reda* n, če iz $nx = 0$ sledi $x = 0$. Namesto $xy - yx$ bomo pisali $[x, y]$ in uporabljali identiteti $[xy, z] = [x, z]y + x[y, z]$ in $[x, yz] = [x, y]z + y[x, z]$. Kolobar K je *prakolobar*, če iz $aKb = (0)$ sledi $a = 0$ ali $b = 0$, oziroma *polprakolobar*, če iz $aKa = (0)$ sledi $a = 0$. Aditivno preslikavo $D: K \to K$ imenujemo *odvajanje*, če za vsak par $x, y \in K$ velja $D(xy) = D(x)y + xD(y)$. Odvajanje D je *notranje*, če ga lahko zapišemo v obliki $D(x) = [a, x]$, kjer je a fiksen element kolobarja K. Aditivno preslikavo $T: K \to K$ imenujemo *levi centralizator*, če za vsak par $x, y \in K$ velja $T(xy) = T(x)y$. Primer za levi centralizator je levo množenje – to je preslikava $T: K \to K$, definirana s predpisom $T(x) = ax$, pri čemer je a fiksen element iz kolobarja K. Podobno definiramo *desni centralizator* kot aditivno preslikavo, kjer za vsak par $x, y \in K$ velja $T(xy) = xT(y)$. Desno množenje $T(x) = xa$ je desni centralizator. V članku [6] zasledimo naslednjo definicijo: Element $a \in K$, kjer je K poljuben kolobar, je *odvisen od preslikave* $F: K \to K$, če je $F(x)a = ax$ za vsak $x \in K$. S tem pojmom je tesno povezana tudi naslednja definicija. Pravimo, da preslikava $F: K \to K$ *deluje prosto* na kolobarju K, če je ničelni element edini, ki je odvisen od preslikave F.

Zgodovina pojma odvisni element sega v prvo polovico prejšnjega stoletja, natančneje v leto 1936, ko sta Murray in von Neumann objavila rezultate o prosto delujočih avtomorfizmih na Abelovih von Neumannovih algebrah – glej [7] in [8]. Odvisne elemente je implicitno uporabil tudi Kallman v [5].

Kasneje so se z odvisnimi elementi ukvarjali tudi Choda, Kasahara in Nakamoto [2]. Več avtorjev je proučevalo odvisne elemente na operatorskih algebrah (glej [3] in [4]). Kratek prispevek o odvisnih elementih na von Neumannovih algebrah najdemo v knjigi Stratile [9]. Laradji in Thaheem sta v [6] raziskovala odvisne elemente na polprakolobarjih. Odvisne elemente in preslikave, ki delujejo prosto na polprakolobarjih, je proučeval tudi Vukman ([10] in [11]).

V članku [6] je med drugim zapisana tale preprosta trditev, ki jo bomo v dokazih večkrat uporabili.

Trditev 1. *V polprakolobarju K je vsak nilpotenten od preslikave F odvisen element enak nič.*

Dokaz. Denimo, da je $a \in K$ od preslikave F odvisen element in naj bo $a^n = 0$ za neko naravno število n. Imamo identiteto

$$F(x)a = ax \quad x \in K\,. \tag{1}$$

Če to enakost množimo z desne z a^{n-1}, dobimo

$$axa^{n-1} = 0\,, \quad x \in K\,.$$

Zgornjo identiteto pomnožimo z leve z a^{n-2}. Ker je K polprakolobar, od tod sledi

$$a^{n-1} = 0\,. \tag{2}$$

Sedaj pomnožimo identiteto (1) z desne z a^{n-2} in upoštevamo (2). S ponovitvijo zgoraj opisanega postopka ugotovimo, da je $a^{n-2} = 0$. Če postopek ponovimo še $(n-3)$-krat, pridemo do $a = 0$. ∎

Trditev 2. *V polprakolobarju K deluje odvajanje prosto na kolobarju K.*

Dokaz. Naj bo $D\colon K \to K$ odvajanje in denimo, da je $a \in K$ od preslikave D odvisen element. Pokazati želimo, da je $a = 0$. Imamo identiteto

$$D(x)a = ax\,, \quad x \in K\,. \tag{3}$$

Ker je D odvajanje, velja

$$D(xy) = D(x)y + xD(y)$$

za vsak par $x, y \in K$. Enačbo pomnožimo z desne z a, upoštevamo (3) in dobimo

$$axy = D(x)ya + xay\,, \quad x, y \in K\,.$$

Če vstavimo $y = a$ in spet upoštevamo (3), dobimo $xa^2 = 0$, $x \in K$. Ker je K polprakolobar, od tod sledi $a^2 = 0$ in po trditvi 1 še $a = 0$. ∎

Naslednji izrek je posplošitev prejšnje trditve in ga navedemo brez dokaza.

Izrek 3. [12, izrek 3] *Naj bo K polprakolobar brez elementov reda dva in D in G odvajanji na K. Potem deluje preslikava $x \mapsto D\left(D(x)\right) + G(x)$ prosto na kolobarju K.*

Za naslednji rezultat potrebujemo koncept tako imenovanih posplošenih odvajanj.

Aditivno preslikavo $F\colon K \to K$, kjer je K poljuben kolobar, imenujemo *posplošeno odvajanje*, če velja $F(xy) = F(x)y + xD(y)$ za vsak par $x, y \in K$, pri čemer je $D\colon K \to K$ odvajanje.

Ni težko pokazati, da je F posplošeno odvajanje natanko takrat, ko je F oblike $F = D + T$, kjer je D odvajanje iz zgornje definicije in T levi centralizator.

Izrek 4. [12, izrek 4] *Naj bo $F\colon K \to K$ posplošeno odvajanje v polprakolobarju K. Če je element $a \in K$ odvisen od preslikave F, potem je $a \in Z(K)$.*

Dokaz. Denimo, da je $a \in K$ od preslikave F odvisen element. Imamo identiteto

$$F(x)a = ax\,, \quad x \in K\,. \tag{4}$$

V njej nadomestimo x z xy in dobimo

$$\left(F(x)y + xD(y)\right)a = axy\,, \quad x, y \in K\,. \tag{5}$$

Sedaj uporabimo dejstvo, da lahko posplošeno odvajanje F zapišemo kot $F = D + T$, pri čemer je T levi centralizator. V (5) tako nadomestimo $D(y)a$ z izrazom $F(y)a - T(y)a$. Zaradi (4) dobimo

$$F(x)ya + [x, a]y - xT(y)a = 0\,, \quad x, y \in K\,. \tag{6}$$

Tu zamenjamo y z $yF(x)$. Tako imamo

$$F(x)yF(x)a + [x, a]yF(x) - xT(y)F(x)a = 0\,, \quad x, y \in K\,,$$

zaradi (4) pa se zgornja identiteta poenostavi v

$$F(x)yax + [x, a]yF(x) - xT(y)ax = 0\,, \quad x, y \in K\,.$$

Če pomnožimo (6) z desne z x, dobimo

$$F(x)yax + [x, a]yx - xT(y)ax = 0\,, \quad x, y \in K\,.$$

Ko odštejemo zadnji dve enačbi, pridemo do

$$[x,a]y\,(F(x)-x)=0\,,\quad x,y\in K\,.$$

Če pomnožimo zgornjo identiteto z desne z a in še enkrat upoštevamo (4), dobimo $[x,a]y[x,a]=0$, $x,y\in K$. Ker je K polprakolobar, od tod sledi $[x,a]=0$, $x\in K$. ∎

Posledica 5. [12, posledica 5] *Naj bo K polprakolobar in naj bosta $a,b\in K$ fiksna elementa. Denimo, da je element $c\in K$ odvisen od preslikave $x\mapsto ax+xb$. Potem je $c\in Z(K)$.*

Dokaz. Hitro se prepričamo, da je preslikava $x\mapsto ax+xb$ posplošeno odvajanje. Zato po izreku 4 velja $c\in Z(K)$. ∎

V teoriji operatorskih algeber ima preslikava $x\mapsto ax+xb$, ki smo jo srečali v zgornji posledici, posebno vlogo, saj jo proučujejo kot pomemben razred tako imenovanih *elementarnih operatorjev*, to je preslikav oblike $x\mapsto\sum_{i=1}^n a_ixb_i$. Naslednji izrek obravnava malo drugačne elementarne operatorje. Za njegov dokaz potrebujemo definicijo ražsirjenega centroida in teorijo kolobarjev kvocientov, zato ga bomo tu izpustili. Radovedni bralec lahko najde podrobnosti iz teorije kolobarjev kvocientov v [1], dokaz izreka pa v [12].

Izrek 6. [12, izrek 9] *Naj bo K nekomutativen prakolobar brez elementov reda dva in naj bosta $a,b\in K$ fiksna elementa. Potem deluje preslikava $x\mapsto axb-bxa$ prosto na kolobarju K.*

Rezultati v nadaljevanju prispevka so v povezavi z avtomorfizmi.

Izrek 7. [12, izrek 10] *Naj bo K polprakolobar ter α in β avtomorfizma na K. Potem deluje preslikava $\alpha+\beta$ prosto na K.*

Dokaz. Denimo, da je $a\in K$ od preslikave $\alpha+\beta$ odvisen element. Dokazati želimo, da je $a=0$. Imamo identiteto

$$(\alpha(x)+\beta(x))\,a=ax\,,\quad x\in K\,. \tag{7}$$

V njej nadomestimo x z xy. Dobimo

$$(\alpha(x)\alpha(y)+\beta(x)\beta(y))\,a=axy\,,\quad x,y\in K\,.$$

Če sedaj v zgornji identiteti nadomestimo najprej ax z $(\alpha(x)+\beta(x))\,a$ in potem ay z $(\alpha(y)+\beta(y))\,a$, pridemo do

$$(\alpha(x)\alpha(y)+\beta(x)\beta(y))\,a=(\alpha(x)+\beta(x))\,(\alpha(y)+\beta(y))\,a\,,\quad x,y\in K\,.$$

To identiteto lahko krajše zapišemo kot

$$\alpha(x)\beta(y)a + \beta(x)\alpha(y)a = 0\,, \quad x, y \in K\,. \tag{8}$$

Če v tej enačbi naredimo substitucijo zx namesto x, dobimo

$$\alpha(z)\alpha(x)\beta(y)a + \beta(z)\beta(x)\alpha(y)a = 0\,, \quad x, y, z \in K\,,$$

če pa jo pomnožimo z leve z $\alpha(z)$, dobimo

$$\alpha(z)\alpha(x)\beta(y)a + \alpha(z)\beta(x)\alpha(y)a = 0\,, \quad x, y, z \in K\,.$$

Zadnji dve enakosti odštejemo in pridemo do $(\alpha(z) - \beta(z))\,\beta(x)\alpha(y)a = 0$, $x, y, z \in K$. Ker sta α in β avtomorfizma, pretečeta $\beta(x)$ in $\alpha(y)$ ves K, ko pretečeta x in y ves K. Torej imamo

$$(\alpha(z) - \beta(z))\,xya = 0\,, \quad x, y, z \in K\,.$$

V zgornjo identiteto pišemo $x = a$ in $y\,(\alpha(z) - \beta(z))$ namesto y. Tako pridemo do zveze $(\alpha(z) - \beta(z))\,ax\,(\alpha(z) - \beta(z))\,a = 0$, $x, z \in K$. Ker je K polprakolobar, od tod sledi

$$\alpha(z)a = \beta(z)a\,, \quad z \in K\,.$$

Zato lahko v identiteti (8) nadomestimo $\beta(y)a$ z $\alpha(y)a$, kar pomeni, da je $(\alpha(x) + \beta(x))\,\alpha(y)a = 0$, $x, y \in K$. Torej imamo

$$(\alpha(x) + \beta(x))\,ya = 0\,, \quad x, y \in K\,.$$

Če sedaj še v zgornjo identiteto pišemo $y = a$ in nadomestimo $(\alpha(x) + \beta(x))\,a$ z ax, dobimo $axa = 0$, $x \in K$. Ker je K polprakolobar, od tod sledi, da je $a = 0$. ∎

Sedaj si zastavimo naslednje vprašanje: Kaj lahko dokažemo, če imamo v zgornjem izreku namesto vsote razliko dveh avtomorfizmov? Preslikava $\alpha - \beta$, pri čemer sta α in β avtomorfizma, je poseben primer tako imenovanih (α, β)-odvajanj.

Aditivna preslikava $D\colon K \to K$, kjer je K poljuben kolobar, je (α, β)-*odvajanje*, če velja

$$D(xy) = D(x)\alpha(y) + \beta(x)D(y)$$

za vsak par $x, y \in K$, pri čemer sta α in β avtomorfizma kolobarja K.

Izrek 8. [12, izrek 11] *Naj bo K polprakolobar in $D\colon K \to K$ naj bo (α, β)-odvajanje. Potem D deluje prosto na kolobarju K.*

Dokaz. Denimo, da je $a \in K$ od preslikave D odvisen element. Dokazati želimo, da je $a = 0$. Imamo identiteto

$$D(x)a = ax\,, \quad x \in K\,. \tag{9}$$

V njej nadomestimo x z xy in dobimo

$$D(x)\alpha(y)a + \beta(x)D(y)a = axy\,, \quad x, y \in K\,. \tag{10}$$

Sedaj nadomestimo $D(y)a$ z ay. Tako imamo

$$D(x)\alpha(y)a + (\beta(x)a - ax)\,y = 0\,, \quad x, y \in K\,.$$

Če v tej enakosti pišemo yz namesto y, dobimo

$$D(x)\alpha(y)\alpha(z)a + (\beta(x)a - ax)\,yz = 0\,, \quad x, y, z \in K\,.$$

Če pa jo pomnožimo z desne z z, dobimo

$$D(x)\alpha(y)az + (\beta(x)a - ax)\,yz = 0\,, \quad x, y, z \in K\,.$$

Zadnji enačbi odštejemo in dobimo zvezo $D(x)\alpha(y)\,(\alpha(z)a - az) = 0$ za $x, y, z \in K$. Z drugimi besedami, imamo

$$D(x)y\,(\alpha(z)a - az) = 0\,, \quad x, y, z \in K\,.$$

S substitucijo ay namesto y in z upoštevanjem (9) nam to da

$$axy\,(\alpha(z)a - az) = 0\,, \quad x, y, z \in K\,.$$

Če tu nadomestimo x z zx, dobimo

$$azxy\,(\alpha(z)a - az) = 0\,, \quad x, y, z \in K\,.$$

Če pa pomnožimo z leve z $\alpha(z)$, pridemo do

$$\alpha(z)axy\,(\alpha(z)a - az) = 0\,, \quad x, y, z \in K\,.$$

Spet odštejemo zadnji enakosti in tako dobljeno identiteto pomnožimo z desne strani z x. Tako pridemo do

$$(\alpha(z)a - az)\,xy\,(\alpha(z)a - az)\,x = 0\,, \quad x, y, z \in K\,,$$

od koder sledi najprej

$$(\alpha(z)a - az)\,x = 0\,, \quad x, z \in K\,,$$

in nato še

$$\alpha(z)a - az = 0\,, \quad z \in K\,. \tag{11}$$

Sedaj pišimo $D(x)a$ namesto ax in ay namesto $D(y)a$ v (10). Tako dobimo $D(x)\,(\alpha(y)a - ay) + \beta(x)ay = 0$, $x, y \in K$, ta zveza pa se zaradi (11) poenostavi v $\beta(x)ay = 0$, $x, y \in K$, od koder sledi $a = 0$. ∎

Posledica 9. [12, posledica 12] *Naj bo K polprakolobar ter α in β avtomorfizma na K. Potem delujeta preslikavi $\alpha - \beta$ in $x \mapsto a\alpha(x) - \beta(x)a$, kjer je $a \in K$ fiksen element, prosto na kolobarju K.*

Dokaz. Omenjeni preslikavi sta (α, β)-odvajanji, zato je to poseben primer izreka 8. ∎

Posledica 10. [12, posledica 13] *Naj bo K polprakolobar, $D: K \to K$ odvajanje in $\alpha: K \to K$ avtomorfizem. Potem delujejo preslikave $x \mapsto D(\alpha(x))$, $x \mapsto \alpha(D(x))$, $x \mapsto D(\alpha(x)) + \alpha(D(x))$ in $x \mapsto D(\alpha(x)) - \alpha(D(x))$ prosto na kolobarju K.*

Dokaz. Posledica je poseben primer izreka 8, ker so vse omenjene preslikave (α, α)-odvajanja. ∎

LITERATURA

[1] K. I. Beidar, W. S. Martindale 3rd in A. V. Mikhalev, *Rings with Generalized Identities*, Marcel Dekker, 1996.

[2] M. Choda, I. Kasahara in R. Nakamoto, *Dependent elements of automorphisms of a C^*-algebra*, Proc. Japan Acad. **48** (1972), str. 561–565.

[3] H. Choda, *On freely acting automorphisms of operator algebras*, Kodai Math. Sem. Rep. **26** (1974), str. 1–21.

[4] H. Choda in Y. Watatani, *Subfreely acting automorphisms of operator algebras*, Math. Japonica **26** (1981), str. 223–232.

[5] R. R. Kallman, *A generalization of free action*, Duke Math. J. **36** (1969), str. 781–789.

[6] A. Laradji in A. B. Thaheem, *On dependent elements in semiprime rings*, Math. Japon. **47** (1998), str. 29–31.

[7] F. J. Murray in J. von Neumann, *On range of operators*, Ann. of Math. **37** (1936), str. 116–229.

[8] J. von Neumann, *On rings of Operators III*, Ann. of Math. **41** (1940), str. 94–161.

[9] S. Stratila, *Modular Theory in Operator Algebras*, Abacus Press, Kent, 1981.

[10] J. Vukman, *Free actions of semiprime rings with involution induced by a derivation*, Demonstratio Math. **38** (2005) 4, str. 811–817.

[11] J. Vukman, *On dependent elements and related problems in rings*, Int. Math. J. **6** (2005) 2, str. 93–112.

[12] J. Vukman in I. Kosi–Ulbl, *On dependent elements in rings*, Internat. J. Math. & Math. Sci. **54** (2004), str. 2895–2906.

UREJENOST IN TEKOČI KRISTALI

TOMAŽ KRANJC

Pedagoška fakulteta
Univerza v Ljubljani

PACS: 61.30.-v, 61.30.Dk, 64.70.Md

V prispevku uvedemo pojem urejenosti in predstavimo Landau-de Gennovo teorijo povprečnega polja. Računsko obdelamo fazni prehod iz izotropne v nematično tekočekristalno fazo na osnovi Landauove teorije in teorije efektivnega enodelčnega molekularnega potenciala.

Prispevek je namenjen predvsem študentom, ki se na dodiplomskem ali podiplomskem študiju prej ali slej srečajo s pojmi urejenosti, faznega prehoda in s tekočimi kristali.

ORDER AND LIQUID CRYSTALS

The concept of order is introduced and an outline of the Landau mean field theory is presented. Phase transition from isotropic to nematic phase is worked out numerically, both using Landau mean field theory approach as well as effective one-molecule potential.

The article is intended for under- and post-graduate students which sooner or later will have to deal with the concepts of order, phase transitions and liquid crystals.

1. Uvod

V naravi najdemo snov v najrazličnejših ravnovesnih in neravnovesnih stanjih, ki se med seboj razlikujejo po svoji mikroskopski zgradbi in makroskopskih lastnostih. Strukturo snovi karakterizirajo povprečne lege delcev, njihove orientacije in prostorske korelacije med njimi. Za opis termodinamičnega stanja homogenih in izotropnih tekočin zadoščajo tri makroskopske spremenljivke, npr. prostornina, število delcev in notranja energija. Številnih stanj s posebnim orientacijskim in translacijskim redom, v katerih se lahko pojavlja kondenzirana snov, pa ne moremo opisati samo s temi spremenljivkami. Različne tipe urejenosti, ki se pojavljajo v naravi, lahko kvantificiramo z uvedbo ureditvenih parametrov*.

Preprost način za študij različnih urejenih faz in faznih prehodov je *teorija povprečnega polja* [1–3]. V tem približku obravnavamo termodinamične lastnosti sistema tako, da nadomestimo dejansko konfiguracijo lokalnih spremenljivk z njihovo povprečno vrednostjo in vzamemo, da se ureditveni parameter s krajem ne spreminja. To pomeni, da zanemarimo vpliv fluktuacij okrog povprečja. Dobro se obnese, če prostorske fluktuacije niso pomembne.

*= parametrov reda

Teorija povprečnega polja pravilno opisuje kvalitativne lastnosti večine faznih prehodov, včasih pa daje tudi kvantitativno pravilne rezultate. Nasploh je dober približek v visokih dimenzijah. Pri dimenzijah pod *zgornjo kritično dimenzijo* d_c (tipično je $d_c = 4^\dagger$) fluktuacije dovolj blizu temperature faznega prehoda T_c vedno postanejo pomembne, tako da blizu T_c teorija povprečnega polja odpove. Preprosto sliko o tem, kdaj je približek povprečnega polja dober in kdaj ne, da naslednji premislek o feromagnetih. Vzemimo neki spin (magnetni moment) v feromagnetu. Če interagira le z dvema sosedoma, je povprečje slaba mera za interakcijo, fluktuacije so velike in pomembne. Ko pa interagira več spinov z izbranim spinom, vidi le-ta bolje okrog sebe efektivno povprečje. Število spinov, ki ustvarjajo efektivno polje, narašča z dosegom interakcije in z dimenzijo sistema. Zato je teorija povprečnega polja bolj uspešna v višjih dimenzijah.

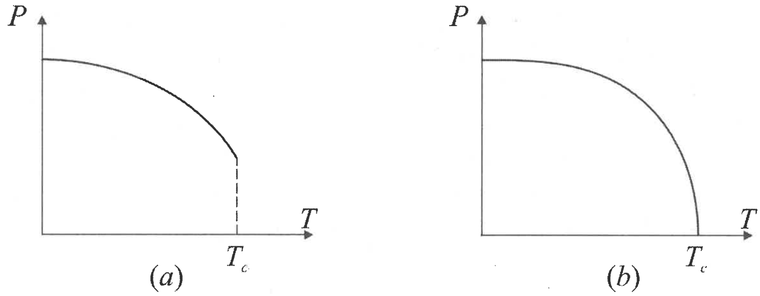
Poznamo več formulacij teorije povprečnega polja, npr. Weissova teorija molekularnega polja za feromagnetizem [1–2], predvsem pa Landauova fenomenološka teorija [3], ki jo bomo predstavili bolj podrobno. Posebna prednost teorij povprečnega polja je njihova matematična enostavnost.

Med faznimi prehodi navadno ločujemo zvezne in nezvezne fazne prehode (fazne prehode prvega in drugega reda). Pri visokih temperaturah imamo neurejeno fazo in ureditveni parameter je enak nič. Pri kritični temperaturi T_c se začne vzpostavljati urejena faza. Če ureditveni parameter pri prehodu raste zvezno od vrednosti nič, pravimo, da je prehod drugega reda, če pa pri temperaturi T_c nezvezno poskoči na od nič različno vrednost, je prehod prvega reda (slika 1).

Landauova teorija je zasnovana za fazne prehode 2. reda. Sloni na predpostavki, da je ureditveni parameter v bližini prehoda majhen. Za določen fazni prehod lahko tedaj razvijemo prosto energijo‡ v vrsto po ureditvenem parametru (ali parametrih) in dovolj je, če obdržimo v razvoju le najnižje člene, kakršne zahteva simetrija. Obliko Landauove proste energije popolnoma določa narava zlomljene simetrije v urejeni fazi, tj. kombinacije ureditvenih parametrov, ki ostanejo invariantne za simetrijske operacije hamiltonke. Metoda je najbolj uporabna v bližini zveznih faznih prehodov, kjer je ureditveni parameter zanesljivo majhen. Včasih pa jo je mogoče uporabljati tudi pri faznih prehodih prvega reda, čeprav se ureditveni parameter

†Realni sistemi seveda ne morejo biti več kakor tridimenzionalni. Pomen višjedimenzionalnih sistemov je v tem, da so to rešljivi sistemi, ki so najbliže tridimenzionalnim, katerih kritično obnašanje nas v resnici zanima.

‡Pomen proste energije $F = W - TS_E$ (W je notranja energija, S_E pa entropija) je v tem, da je stabilna struktura nekega sistema pri temperaturi T določena z minimumom proste energije. Sistem bo prešel iz faze I v fazo II, če obstaja temperatura T_c, za katero je $F_{\mathrm{I}}(T_c) = F_{\mathrm{II}}(T_c)$.



Slika 1. Potek ureditvenega parametra P v odvisnosti od temperature. (a) Pri prehodu prvega reda parameter P pri segrevanju pri temperaturi T_c nezvezno pade na nič (npr. pri prehodu med nematično in izotropno tekočekristalno fazo), (b) pri prehodu drugega reda se zvezno zmanjša na nič (npr. prehod smektična faza $A \longleftrightarrow$ smektična faza C, pa tudi prehod med paramagnetno in feromagnetno fazo v magnetih).

spremeni nezvezno. Stabilno strukturo pri neki temperaturi T dobimo iz zahteve, da ima prosta energija minimum, oz. da je prvi odvod proste energije po ureditvenem parametru (parametrih) nič in drugi pozitiven.

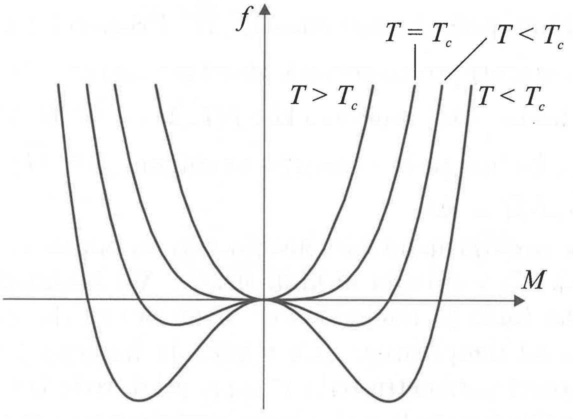
2. Landauova teorija

Ravnovesno termodinamiko določa prosta energija $F[T, P(\boldsymbol{r})]$, kjer je $P(\boldsymbol{r})$ *lokalni* ureditveni parameter (slika 2).

Prosta energija F mora biti invariantna za simetrijsko grupo $\mathcal{G}$ neurejene faze. Ker pa je $P(\boldsymbol{r})$ pri temperaturah $T > T_c$ enak nič, se zdi smiselna domneva, da lahko razvijemo F v vrsto po $P(\boldsymbol{r})$, vsaj v dovolj neposredni bližini kritične točke. Če se ureditveni parameter v urejeni fazi s krajem ne spreminja, lahko izrazimo prosto energijo F s pomočjo gostote proste energije $f(T, P(\boldsymbol{r}))$, ki ni več funkcional polja $P(\boldsymbol{r})$, marveč funkcija polja $P(\boldsymbol{r})$ v točki $\boldsymbol{r}$. V kontinuumski limiti, ko so prostorske variacije ureditvenega parametra majhne na razdalji velikostnega reda medatomskih razdalj, je vodilni prispevek k F zaradi nehomogenosti parametra reda sorazmeren s kvadratom gradienta parametra reda. Višje gradiente lahko upravičeno zanemarimo, če so prostorske spremembe majhne na mikroskopski skali, ki jo določa doseg interakcije.

Gradientni člen v izrazu za gostoto proste energije zmanjšuje odmike, saj se s povečevanjem odmikov prosta energija povečuje. Najpreprostejša oblika za F je tedaj

$$F = \int d\boldsymbol{r}\, f(T, P(\boldsymbol{r})) + \int d\boldsymbol{r}\, \frac{1}{2} c \left[\nabla P(\boldsymbol{r})\right]^2, \tag{2.1}$$



Slika 2. Pri feromagnetu je parameter reda magnetizacija in v bližini faznega prehoda lahko po njej razvijemo gostoto proste energije v vrsto: $f \equiv F(T, M)/V = \frac{1}{2}AM^2 + BM^4 + \cdots$ Če ni zunanjega polja, nastopajo v razvoju le sode potence M, saj se prosta energija ne spremeni, če magnetizacija spremeni predznak. Koeficient pri najvišji potenci M mora biti pozitiven (v gornjem izrazu $B > 0$), saj bi imela sicer prosta energija minimum pri $M = \pm\infty$. V Landauovi teoriji je kritična temperatura T_c tista temperatura, pri kateri koeficient $A(T)$ spremeni predznak; v bližini T_c lahko vzamemo A kot linearno funkcijo temperature in zapišemo $A(T) = a(T - T_c)$. Za druge parametre v razvoju vzamemo, da niso odvisni od temperature. Minimum f poiščemo tako, da zahtevamo, da je prvi odvod 0, drugi pa pozitiven. Za $A > 0$ ($T > T_c$) ima f en sam minimum pri $M = 0$: to je visokotemperaturna izotropna faza. Pri $A < 0$ ($T < T_c$) ima f pri $M = 0$ maksimum, poleg tega pa ima dva simetrično ležeča minimuma pri $M = \pm\sqrt{-A/4B}$. Slika kaže potek f v odvisnosti od magnetizacije za različne temperature.

Enako velja za fazne prehode nematična $\longleftrightarrow$ smektična faza A pri večini tekočih kristalov.

kjer je c fenomenološka konstanta. V nadaljevanju se bomo omejili na sisteme, v katerih ureditveni parameter ni odvisen od kraja.

Gostoto proste energije f lahko razvijemo v vrsto po $P(\boldsymbol{r}) = P$. Nad temperaturo T_c mora biti P enak nič, če je le zunanje polje (označimo ga s h) enako nič. Parameter reda P in konjugirano polje h sta povezana z enačbo stanja, $\partial f/\partial P = h$, zato v razvoju f po P ne more biti linearnega člena. Tedaj je

$$f(T, P) = \frac{1}{2}AP^2 - BP^3 + CP^4 + \cdots \tag{2.2}$$

A, B in C so koeficienti v razvoju gostote proste energije po ureditvenem parametru.

Kot ilustracijo za zvezo med parametrom reda in konjugiranim poljem, $\partial f/\partial P = h$, lahko navedemo feromagnetno snov. Gostota magnetnega polja $\vec{B}$ je konjugirano polje k magnetizaciji $\overrightarrow{M}$. Prispevek zunanjega magnetnega polja $\vec{B}$ h gostoti proste energije snovi je namreč $-\overrightarrow{M} \cdot \vec{B}$ [4]. Gostoto proste energije lahko tedaj zapišemo kot $f(T, \overrightarrow{M}) - \overrightarrow{M} \cdot \vec{B}$. V termodinamičnem ravnovesju, ko ima prosta energija minimum, $f(T, \overrightarrow{M}) - \overrightarrow{M} \cdot \vec{B} = \min$, mora veljati $\partial f / \partial \overrightarrow{M} = \vec{B}$.[§]

Vsak člen v razvoju mora biti invarianten za operacije grupe $\mathcal{G}$. Zato se pogosto zgodi, da v razvoju ni lihih členov. Vsi koeficienti v razvoju A, B in C so lahko funkcije temperature. Vzeli bomo, da sta koeficienta B in C neodvisna od temperature. Če v razvoju funkcije f vrsto odrežemo pri določeni potenci parametra reda P (npr. pri 4. redu kot v (2.2)), potem mora biti člen najvišjega reda sod, njegov koeficient pa pozitiven, tako da je v ravnovesnem stanju vrednost P omejena.

Pri visokih temperaturah mora biti ureditveni parameter P nič, če ni zunanjih polj ($h = 0$). Torej mora imeti gostota proste energije f pri visokih temperaturah minimum pri $P = 0$. Pri nizkih temperaturah pa pričakujemo, da bo imela gostota proste energije f vsaj en minimum tudi pri $P \neq 0$. To dosežemo, če dopustimo, da koeficient A pri neki temperaturi spremeni predznak. Zato pišemo

$$A = a(T - T_c)\,. \tag{2.3}$$

Landauovo teorijo lahko uporabimo za opis faznih prehodov pri tekočih kristalih, tudi pri „šibko nezveznih“, kakršen je prehod izotropna faza $\longleftrightarrow$ nematična faza [5–8].

3. Prehod izotropna–nematična faza

Kot primer faznega prehoda med dvema fazama tekočega kristala in uporabe Landauove teorije si oglejmo prehod med izotropno in nematično fazo tekočega kristala [5, 6]. Najprej moramo natančno opredeliti, kakšen parameter reda je potreben za opis nematične tekočekristalne faze [7,8].

Tekoče kristale (pogosto) tvorijo paličaste molekule. V izotropni fazi so orientacije in lege teh molekul naključne. V nematični fazi so lege težišč

[§] V tekočih kristalih je vpliv zunanjih polj bolj kompliciran. Podolgovate molekule v nematičnem tekočem kristalu so navadno diamagnetne, električno polje pa jih polarizira, tako da so anizotropne v magnetnih in električnih lastnostih. Gostota magnetne energije (če zanemarimo konstantni člen) in s tem magnetni prispevek k prosti energiji je $w_m = -\frac{2}{3}(n\Delta\kappa P)(|\vec{B}|^2/2\mu_0)$, kjer je n številska gostota molekul, P ureditveni parameter za nematski tekoči kristal, $\Delta\kappa = \kappa_{\parallel} - \kappa_{\perp}$, $\kappa_{\parallel}$ je vrednost magnetne susceptibilnosti vzdolž magnetnega polja, $\kappa_{\perp}$ pa pravokotno nanj. K ureditvenemu parametru P konjugirano polje je $h = \frac{2}{3}(n\Delta\kappa)(|\vec{B}|^2/2\mu_0)$. Podobno je v električnem primeru.

molekul še vedno naključne, dolge osi molekul pa so v povprečju orientirane vzdolž ureditvenega vektorja $\boldsymbol{n}$. Nematično fazo torej karakterizira zlomljena orientacijska simetrija.

3.1 Ureditveni parameter

Zaznamujmo z $\boldsymbol{\nu}^k$ enotni vektor, ki kaže vzdolž dolge osi k-te molekule, slika 3. Orientacijski ureditveni parameter meri, v kolikšni meri so molekule v povprečju usmerjene v smeri ureditvenega vektorja $\boldsymbol{n}$. Vendar povprečje vektorjev $\boldsymbol{\nu}^k$ po vseh molekulah ni dobra mera, ker kažejo nematične molekule z enako verjetnostjo vzporedno in nasprotno vzporedno s poljubno dano smerjo, zato vektorja $\boldsymbol{\nu}^k$ in $-\boldsymbol{\nu}^k$ enako prispevata k urejenosti. Ureditveni parameter mora biti tedaj sod v $\boldsymbol{\nu}^k$ in vektorski ureditveni parameter tej zahtevi ne zadošča. Pač pa temu ustreza tenzor 2. reda. Do tenzorskega ureditvenega parametra pridemo tako, da iz vektorjev $\boldsymbol{\nu}^k$ sestavimo tenzor 2. reda s sledjo nič in naredimo povprečje po vseh molekulah (tj. po vseh k). Zahtevamo, da je ureditveni parameter v visokotemperaturni izotropni fazi nič, v nizkotemperaturni nematični fazi različen od nič. Označimo ga s $\mathbf{Q}$ in njegove komponente s Q_{ij}, pa lahko zapišemo:

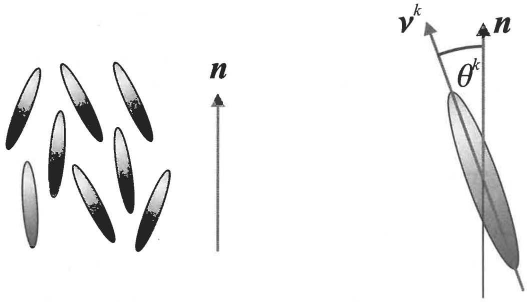
$$Q_{ij} = \frac{1}{N} \sum_k (\nu_i^k \nu_j^k - \delta_{ij}/3) \equiv \langle \nu_i^k \nu_j^k - \delta_{ij}/3 \rangle \,, \tag{3.1}$$

kjer je ν_i^k i-ta komponenta vektorja $\boldsymbol{\nu}^k$, δ_{ij} pa Kroneckerjev simbol: δ_{ij} je 1, če sta indeksa enaka, in 0, če sta različna. $\mathbf{Q}$ lahko predstavimo kot matriko. Sled $\mathrm{Tr}\,\mathbf{Q} = 0$, ker so $\boldsymbol{\nu}^k$ enotni vektorji. V urejenem stanju $\mathbf{Q}$ ni nič. V koordinatnem sistemu, katerega ena os (npr. os z) kaže v smeri, v katero so v povprečju obrnjene molekule, je matrika $\mathbf{Q}$ diagonalna:

$$\mathbf{Q} = \begin{pmatrix} -\frac{1}{3}(S-\eta) & , & 0 & , & 0 \\ 0 & , & -\frac{1}{3}(S+\eta) & , & 0 \\ 0 & , & 0 & , & \frac{2}{3}S \end{pmatrix} . \tag{3.2}$$

Če je η od nič različen, pravimo, da je faza dvoosna, in tedaj ima dve, ne le eno privilegirano smer.

Mikroskopsko dvoosne molekule si lahko predstavljamo kot razpotegnjene kvadre z različno dolgima prečnima stranicama, enoosne molekule pa imajo valjasto simetrijo. Če so dvoosne molekule v povprečju enako obrnjene, je (makroskopska) faza dvoosna. Vendar makroskopske faze ne določa le mikroskopska oblika molekul. Enoosne faze lahko tvorijo tudi dvoosne molekule in dvoosne faze tudi enoosne.



Slika 3. V nematični fazi so molekule v povprečju urejene vzdolž ureditvenega vektorja $\boldsymbol{n}$, smer simetrijske osi molekule k pa določa enotni vektor $\boldsymbol{\nu}^k$.

Nematični tekoči kristali so dvoosni le izjemoma, navadno so enoosni, tako da je $\eta = 0$. Tedaj lahko zapišemo

$$Q_{ij} = S(n_i n_j - \delta_{ij}/3)\,, \tag{3.3}$$

kjer je $\boldsymbol{n}$ enotni ureditveni vektor, ki specificira smer glavne osi $\mathbf{Q}$. Iz enačbe (3.1) vidimo, da je

$$S = \frac{1}{2}\langle 3(\boldsymbol{\nu}^k \cdot \boldsymbol{n})^2 - 1\rangle = \frac{1}{2}\langle 3\cos^2\theta^k - 1\rangle\,, \tag{3.4}$$

θ^k je kot med glavno osjo molekule k in ureditvenim vektorjem $\boldsymbol{n}$.

Prepričajmo se o pravilnosti (3.3), npr. za komponento Q_{xx}. Izberimo koordinatni sistem tako, da kaže ureditveni vektor $\boldsymbol{n}$ v smeri osi z, $\boldsymbol{n} = (0, 0, 1)$. Enotni vektor vzdolž glavne osi k-te molekule lahko tedaj zapišemo kot $\boldsymbol{\nu}^k = (\sin\theta^k\cos\varphi^k, \sin\theta^k\sin\varphi^k, \cos\theta^k)$, pri čemer je θ^k polarni, φ^k pa azimutni kot. Za Q_{xx} dobimo: $Q_{xx} = 1/N\sum_k(\nu_x^k\nu_x^k - \frac{1}{3}\delta_{xx}) = \langle(\nu_x^k)^2 - \frac{1}{3}\rangle = \langle(\sin\theta^k\cos\varphi^k)^2 - \frac{1}{3}\rangle$. Porazdelitev molekul po azimutnem kotu je enakomerna, zato je povprečje $\langle\cos^2\varphi^k\rangle = \frac{1}{2}$. Tedaj je $Q_{xx} = \langle\frac{1}{2}\sin^2\theta^k - \frac{1}{3}\rangle = \langle\frac{1}{2}(1 - \cos^2\theta^k) - \frac{1}{3}\rangle = -\frac{1}{3}\langle\frac{3}{2}\cos^2\theta^k - \frac{1}{2}\rangle = -\frac{1}{3}S$, pri čemer je S podan s (3.4). Vidimo tudi, da je $(n_x n_x - \frac{1}{3}\delta_{xx}) = -\frac{1}{3}$, tako da je res $Q_{xx} = -\frac{1}{3}S = S(n_x n_x - \frac{1}{3}\delta_{xx})$. Na enak način se lahko prepričamo, da velja (3.3) za vse komponente tenzorja $\mathbf{Q}$.

3.2 Prosta energija

Razliko gostote proste energije med izotropno in nematično fazo zapišemo kot vrsto po potencah $\mathbf{Q}$. Vsi členi vrste morajo biti skalarji. Posamezni členi imajo lahko tedaj obliko

$$\sum_i Q_{ii} = \operatorname{Tr}\mathbf{Q} = 0\,, \quad \sum_{ij} Q_{ij}Q_{ji} = \operatorname{Tr}\mathbf{Q}^2, \quad \sum_{ijk} Q_{ij}Q_{jk}Q_{kj} = \operatorname{Tr}\mathbf{Q}^3,$$

$$\left|\sum_{ij} Q_{ij}Q_{ji}\right|^2 = \left(\operatorname{Tr}\mathbf{Q}^2\right)^2, \quad \sum_{ijkl} Q_{ij}Q_{jk}Q_{kl}Q_{lj} = \operatorname{Tr}\mathbf{Q}^4 = \frac{1}{2}\left(\operatorname{Tr}\mathbf{Q}^2\right)^2, \text{ itn.}$$

Torej lahko nastopajo v vrsti le členi oblike $\operatorname{Tr}\mathbf{Q}^p$, $p = 2, 3, \ldots$, ki so vsi skalarji. Člen s $p = 1$ je sled $\mathbf{Q}$, ki je enaka 0. Zato lahko zapišemo gostoto proste energije do 4. reda v parametru reda $\mathbf{Q}$ kot

$$f = f_0 + \frac{1}{2}A' \operatorname{Tr}\mathbf{Q}^2 - B' \operatorname{Tr}\mathbf{Q}^3 + C_1\left(\operatorname{Tr}\mathbf{Q}^2\right)^2 + C_2 \operatorname{Tr}\mathbf{Q}^4.$$

Sled potenc parametra reda $\mathbf{Q}^p$ brez težav izračunamo, saj je sled tenzorja neodvisna od koordinatnega sistema. Izračunamo jo v lastnem koordinatnem sistemu, v katerem je $\mathbf{Q}$ podan s (3.2). Za enoosne tekoče kristale je $\eta = 0$ in $\operatorname{Tr}\mathbf{Q}^2 = \frac{2}{3}S^2$, $\left(\operatorname{Tr}\mathbf{Q}^2\right)^2 = \frac{4}{9}S^4$, $\operatorname{Tr}\mathbf{Q}^3 = \frac{2}{9}S^3$ in $\operatorname{Tr}\mathbf{Q}^4 = \frac{2}{9}S^4$. Gostoto proste energije lahko tako zapišemo

$$f = f_0 + \frac{1}{2}AS^2 - BS^3 + CS^4, \tag{3.5}$$

($A = \frac{2}{3}A'$, $B = \frac{2}{9}B'$ in $C = \frac{2}{9}(2C_1 + C_2)$).

Spet bomo vzeli, da sta B in C neodvisna od temperature, A pa pri neki temperaturi T_1 spremeni predznak,

$$A = a(T - T_1)\,. \tag{3.6}$$

V enačbi (3.5) nastopa v razvoju proste energije po ureditvenem parametru S tudi člen 3. reda – z liho potenco. Če bi bil parameter reda vektor, bi bil tak člen prepovedan zaradi simetrije. (Vzemimo primer feromagnetne snovi: zaradi obrata magnetizacije, $\vec{M} \to -\vec{M}$, se prosta energija nič ne spremeni. Torej v razvoju ne more biti lihih členov.) Vendar imajo paličaste molekule drugačno simetrijo kakor vektorji in lihi členi se v razvoju lahko pojavijo. To privede do asimetrije proste energije f v odvisnosti od S in do tega, da se pri končnem S pojavi poleg centralnega še drugi minimum v f. Zato je prehod izotropna–nematična faza prehod 1. reda.

Ocenimo koeficiente a, B in C, ki nastopajo v izrazu za gostoto proste energije (3.5). Gre nam le za velikostni red, zato si pomagamo kar z dimenzijsko analizo. Za interakcijsko energijo med molekulami vzamemo vrednost

10^{-2} eV, za tipično razdaljo med njimi 1 nm, za tipično temperaturo T_c pa 300 K.

Koeficient a ima enoto $\mathrm{J/m^3K}$; za oceno lahko vzamemo $a \sim 10^{-2}$ eV/ $\left((10^{-9}\ \mathrm{m})^3 \cdot 300\ \mathrm{K}\right) \sim 10\ \mathrm{kJ/m^3K}$. Koeficienta B in C imata oba enoto $\mathrm{J/m^3}$ in ju ocenimo na $B, C \sim 10^{-2}\ \mathrm{eV}/\left(10^{-9}\ \mathrm{m}\right)^3 \sim 1000\ \mathrm{kJ/m^3}$.

Za primerjavo: iz eksperimentov dobljene vrednosti npr. za tekoči kristal MBBA (4-metoksibenziliden-4'-butilanilin) so $a = 63\ \mathrm{kJ/m^3K}$, $B = 160\ \mathrm{kJ/m^3}$ in $C = 200\ \mathrm{kJ/m^3}$.

Glavne značilnosti gostote proste energije prikazuje slika 4. Narisali smo funkcijo

$$\frac{\Delta f}{aT_1} = \frac{1}{2}\left(\frac{T}{T_1} - 1\right)S^2 - \mathcal{B}S^3 + \mathcal{C}S^4,$$

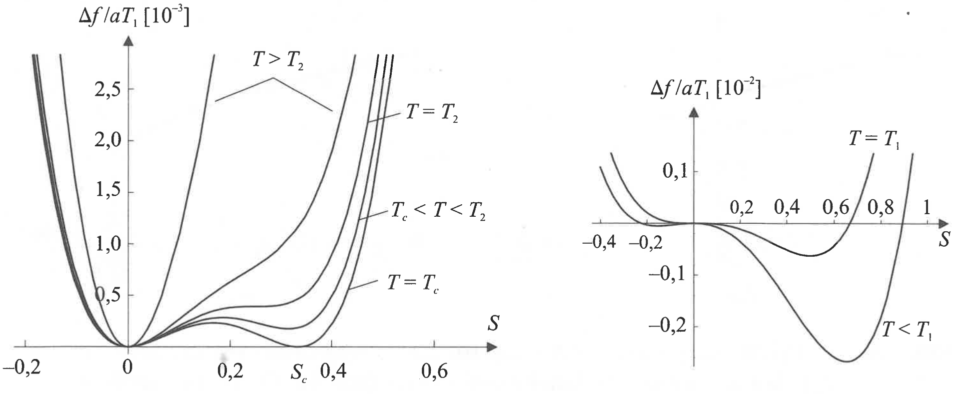
kjer smo zaznamovali $\Delta f = f - f_0$, $\mathcal{B} = B/aT_1$, $\mathcal{C} = C/aT_1$ ter izbrali $\mathcal{B} = 0{,}1$ in $\mathcal{C} = 0{,}15$.

Ravnovesno stanje sistema določa minimum proste energije, ki je podana s (3.5). Pogoj za ekstrem je

$$\partial f/\partial S = \partial \Delta f/\partial S = \left(A - 3BS + 4CS^2\right) S = 0\,. \tag{3.7}$$

Pri visokih temperaturah ima Δf en sam minimum pri $S = 0$[¶] (glej sliko 4). To ustreza izotropni fazi. Ko se temperatura niža, postaja nesimetrija Δf vse bolj izrazita; na desni strani se vse bolj jasno pojavlja koleno. Pri neki temperaturi T_2 ima koleno vodoravno tangento, pri nekoliko nižji temperaturi pa se že pojavi sekundarni minimum pri $S \neq 0$. Ko temperaturo še znižujemo, postaja sekundarni minimum vse globlji, dokler ne postane enako globok kakor centralni minimum. Temperaturo, pri kateri se to zgodi, imenujemo *kritična temperatura* T_c ali *temperatura faznega prehoda*. Pri tej temperaturi je prosta energija izotropne in urejene faze enaka; pri T_c sta torej obe fazi v ravnovesju. Vidimo, da se parameter reda S pri temperaturi T_c nezvezno spremeni, ko preide sistem iz izotropne faze v nematično ali obratno. Fazni prehod izotropna–nematična faza je torej *prehod*

[¶]Dve ničli odvoda (3.7) določa kvadratna funkcija $g_p = A - 3BS + 4CS^2$, katere graf je parabola. Odvisnost od temperature je v celoti vsebovana v svobodnem členu $A = a(T - T_1)$. Ta določa le lego parabole glede na abscisno os. Pri dovolj visokih temperaturah leži parabola nad abscisno osjo, tako da nima realnih ničel. Odvod $\partial\Delta f/\partial S$ je nič le pri $S = 0$. Ko se temperatura in z njo A manjša, se pri neki temperaturi (T_2) tême parabole dotakne abscisne osi, tako da ima g_p eno dvojno ničlo. Ta določa prevojno točko proste energije Δf. Ko se temperatura še zniža, ima g_p dve realni ničli in za $T > T_1$ ima Δf poleg ekstrema pri $S = 0$ še dva ekstrema (minimum in maksimum) pri $S \neq 0$. Ko je $A = 0$ ($T = T_1$) je $\partial\Delta f/\partial S = (-3B + 4CS)S^2$; pri $S = 0$ ima torej $\partial\Delta f/\partial S$ dvojno ničlo in Δf prevojno točko.



Slika 4. Slika kaže gostoto proste energije ($\Delta f/aT_1$) v odvisnosti od nematičnega parametra reda S za različne temperature v okolici prehoda med izotropno in nematično fazo. Prehod je prvega reda, temperatura prehoda je T_c.

prvega reda. Ko se temperatura še manjša, je minimum Δf pri $S = 0$ vedno plitvejši, minimum pri $S \neq 0$ pa se poglablja. Pri neki temperaturi T_1 se nato zgodi, da pri $S = 0$ nimamo več minimuma, marveč prevojno točko. T_1 je meja metastabilnosti izotropne faze: za temperature $T_1 < T < T_c$ imamo pri $S = 0$ lokalni minimum (ki pa ni globalni minimum), ki nato pri T_1 izgine. Podobno vidimo, da je temperatura T_2 meja metastabilnosti nematične faze: tedaj pri segrevanju izgine sekundarni (necentralni) minimum, ki opisuje nematično fazo.

3.3 Temperaturna odvisnost S in S_c

Poglejmo nekaj rezultatov, ki jih dasta enačbi (3.5) in (3.7).

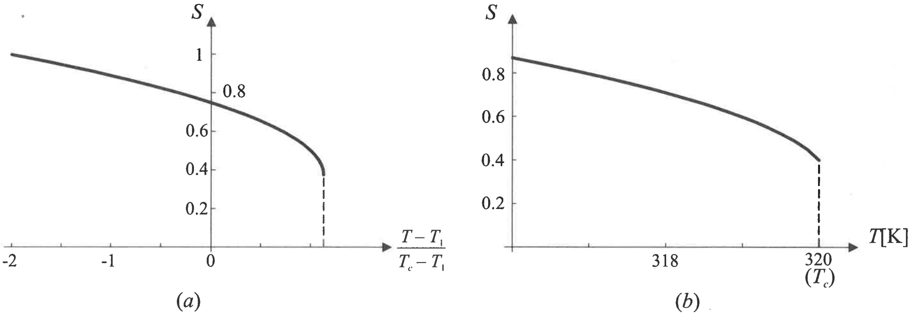
1. Parameter reda S lahko zapišemo kot funkcijo temperature oziroma parametra $A = a(T - T_1)$. Iz enačbe (3.7) dobimo tri rešitve za S,

$$S = 0 \quad \text{in} \quad S = S(A) = \frac{3B}{8C} \pm \sqrt{\left(\frac{3B}{8C}\right)^2 - \frac{A}{4C}}\,. \tag{3.8}$$

   Sistem „izbere“ tisto rešitev, za katero je prosta energija najmanjša.

2. Kritična vrednost parametra reda S_c, tj. njegova vrednost pri temperaturi T_c, je določena s tem, da je $\Delta f(S_c) = 0$ in $\partial \Delta f/\partial S|_{S_c} = 0$. Tedaj je

$$S_c = \frac{B}{2C} \quad \text{ter} \quad A_c = \frac{B^2}{2C} = BS_c$$



Slika 5. (a) Ureditveni parameter S v odvisnosti od reducirane temperature $(T - T_1)/(T_c - T_1)$, kot ga dobimo iz Landauove teorije (enačba (3.9)), (b) ureditveni parameter S v odvisnosti od temperature T za primer MBBA. Račun, s katerim smo dobili ureditveni parameter, velja le v bližini faznega prehoda.

in lahko zapišemo

$$S(A) = \frac{3S_c}{4}\left(1 \pm \sqrt{1 - \frac{8A}{9A_c}}\right). \tag{3.9}$$

Slika 5 kaže ureditveni parameter S v odvisnosti od $A/A_c = (T - T_1)/(T_c - T_1)$ in posebej za primer MBBA ureditveni parameter v odvisnosti od temperature T.

3. Temperaturo T_2 oz. parameter $A_2 = a(T_2 - T_1)$ določimo iz zahteve, da je tedaj pri $S \neq 0$ prevojna točka, gostota proste energije pa je $f > f_0$. Tedaj mora imeti (3.9) eno samo rešitev, torej je $1 - 8A_2/9A_c = 0$ oz. $A_2 = \frac{9}{8}A_c = 9B^2/16C$. Odtod tudi vidimo, da je $a(T_2 - T_c) = a[(T_2 - T_1) - (T_c - T_1)] = A_2 - A_c = (\frac{9}{8} - 1)A_c = A_c/8 = B^2/16C > 0$.

3.4 Latentna toplota

Izračunajmo še toploto („latentno toploto“), ki jo absorbira sistem, ko gre iz nematične v izotropno fazo. Latentna toplota (q) je razlika specifičnih entalpij sistema v končni in začetni fazi [10]: $q = \Delta h = h_I - h_N$ (h_I je specifična entalpija v izotropni fazi, h_N pa v nematični fazi). Specifična entalpija se izraža s spremembo entropije kot $\Delta h = T\Delta s_E$ [9], pri čemer je s_E gostota entropije.

Sedaj moramo ugotoviti, kako se gostota proste energije f v okolici T_c spreminja s temperaturo. Razvijemo f po parametru $A = a(T - T_1)$ okoli A_c: $f(A) = f(A_c) + \frac{\partial f}{\partial A}(A - A_c) + \cdots$ Ker je $\Delta f(A_c) = 0$ in $\left.\frac{\partial f}{\partial A}\right|_{A_c} = \frac{1}{2}S_c^2$, dobimo za gostoto proste energije nematične faze v bližini faznega prehoda v najnižjem redu

$$f = f_0 + \frac{1}{2}(A - A_c)S_c^2 \, . \tag{3.10}$$

Gostota entropije in latentna toplota sta tedaj

$$s_E = -\frac{\partial f}{\partial T} = s_{E,0} - a\,\frac{\partial \Delta f}{\partial A}\,,$$

kjer je $s_{E,0} = -\frac{\partial f_0}{\partial T}$ specifična entropija izotropne faze. Tako dobimo za spremembo specifične entropije pri prehodu iz nematične v izotropno fazo

$$\Delta s_E = s_{E,I} - s_{E,N} = s_{E,0} - s_E = \frac{1}{2}aS_c^2 = \frac{1}{2}a\left(\frac{B}{2C}\right)^2 . \tag{3.11}$$

Latentna toplota pa je (glej npr. [9], str. 70)

$$q = \Delta h = -T_c \Delta s_E = \frac{1}{2}aT_c\left(\frac{B}{2C}\right)^2 . \tag{3.12}$$

Dobljeni rezultati, $S_c = B/2C$ in $T_c - T_1 = B^2/2aC$ (enačbi (3.9)) ter $\Delta s_E = \frac{1}{2}aS_c^2$ rabijo za določanje fenomenoloških parametrov a, B in C, ki nastopajo v izrazu (3.5). Iz eksperimentalno dobljenih vrednosti za S_c, $T_c - T_1$ in Δs_E (oziroma latentne toplote) dobimo $a = 2\Delta s_E/S_c^2$, $B = 2(T_c - T_1)\Delta s_E/S_c^3$ in $C = (T_c - T_1)\Delta s_E/S_c^4$. Npr. za tekoči kristal MBBA so namerili vrednosti $S_c = 0{,}4$, $T_c - T_1 = 1$ K in $q = 1{,}6$ MJ/m^3 ($T_c = 320$ K) ter $\Delta s_E = 5$ kJ/m^{3}K, tako da dobimo $a = 63$ kJ/m^{3}K, $B = 160$ kJ/m^3 in $C = 200$ kJ/m^3.

Preračunajmo gornjo latentno toploto za prehod tekočega kristala iz nematične v izotropno fazo na enoto mase. Vzemimo, da je gostota tekočega kristala enaka kakor gostota vode. Tedaj je $q = 1{,}6$ kJ/kg. Če to primerjamo s talilno toploto ledu, 336 kJ/kg, vidimo, da je q veliko manjša. Zato pravimo, da je prehod med tekočekristalnima fazama $N \longleftrightarrow I$ „šibko“ 1. reda. Latentna toplota ni nič, kakor pri faznih prehodih 2. reda, je pa majhna v primerjavi z običajnimi prehodi 1. reda. Tudi ureditveni parameter S je v okolici prehoda majhen. Prav zato se Landauova teorija, ki je sicer primerna za opis zveznih faznih prehodov, lahko uporablja tudi za „šibko“ nezvezne fazne prehode.

4. Molekularni potencial

Nematične tekočekristalne faze so stabilne zaradi močnih interakcij med molekulami. Kakor v vsaki kondenzirani snovi poskrbijo za vezavo tekočine privlačne sile, odbojne pa preprečujejo, da bi molekule prodirale druga v drugo. Interakcije so v izotropni fazi izotropne, odvisne le od razdalje med molekulami. V nematični tekočekristalni fazi pa so zelo anizotropne: niso odvisne le od razdalje med molekulami, ampak tudi od njihove orientacije. Iz simetrije in strukture nematične faze je očitno, da vzpodbujajo vzporedno orientacijo sosednjih molekul. Maier in Saupe [11] sta prva na osnovi mikroskopske slike opisala fazni prehod med izotropno in nematično fazo. Predpostavila sta, da delujejo med molekulami van der Waalsove sile in v približku povprečnega polja izračunala povprečni potencial, ki ga čuti posamezna molekula.

Dejansko dvodelčnega potenciala ne poznamo popolnoma (poleg van der Waalsove nastopa npr. tudi sterična interakcija). Vendar lahko pridemo do uporabnih rezultatov tudi brez natančne opredelitve potenciala.

Anizotropni del enodelčnega potenciala (U), ki naj bi (kvalitativno) pravilno predstavljal medmolekularne interakcije, mora imeti pravilno odvisnost od kota [12]: ta mora pokazati, da je za molekule energijsko ugodnejše, če se uredijo vzporedno druga z drugo in vzdolž povprečne usmerjenosti, tj. vzdolž ureditvenega vektorja. Torej mora biti najmanjši, kadar so molekule vzporedne z ureditvenim vektorjem, in največji, kadar so pravokotne nanj. Funkcija $-P_2(\cos\theta) = -\frac{1}{2}(3\cos^2\theta - 1)$ je prav taka in nam zato lahko rabi za opis odvisnosti potenciala od kota, zato vzamemo, da je $U \propto -P_2(\cos\theta)$.

V $P_2(\cos\theta)$ prepoznamo Legendrov polinom 2. reda. V 3. razdelku (enačba (3.4)) smo njegovo povprečje $\langle P_2\rangle$ po vseh molekulah vpeljali kot ureditveni parameter.

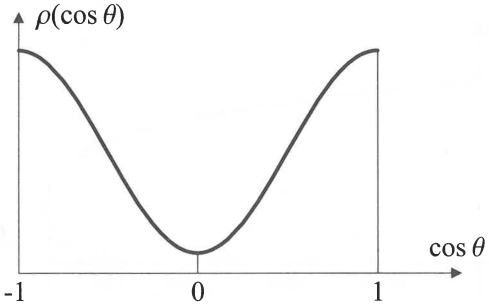
Nadalje mora imeti anizotropni del potenciala U najglobljí minimum v zelo urejeni fazi in mora biti enak nič v povsem neurejeni fazi. Biti mora torej sorazmeren s stopnjo urejenosti, ki jo meri ravno ureditveni parameter, torej povprečje $\langle P_2\rangle$: $U \propto \langle P_2\rangle$. V izraz za potencial moramo vključiti še neki faktor, ki meri njegovo „jakost“ in določa, pri kolikšni temperaturi se zgodi fazni prehod. Ta faktor zaznamujmo z g, $U \propto g$; g je seveda odvisen od snovi.

Če strnemo vse te ugotovitve, dobimo izraz za povprečni potencial, ki ga občuti posamezna molekula:

$$U(\cos\theta) = -g\langle P_2\rangle P_2(\cos\theta)\,. \qquad (4.1)$$

Ko nadomestimo interakcije med posameznimi molekulami s povprečnim potencialom, zanemarimo odstopanje posameznih molekul od povprečnega obnašanja oz. zanemarimo fluktuacije. To je ravno približek *povprečnega* polja.

Sedaj poiščimo orientacijsko porazdelitveno funkcijo $\rho(\cos\theta)$, ki pove, kako so molekule porazdeljene po smereh okrog ureditvenega vektorja (glej sliko 6): $\rho(\cos\theta)$ podaja verjetnostno gostoto, da je posamezna molekula



Slika 6. Kvalitativen prikaz orientacijske porazdelitvene funkcije $\rho(\cos\theta)$ za paličaste molekule v nematični fazi

nagnjena za kot θ glede na ureditveni vektor. Porazdelitvena funkcija je največja okrog kotov $\theta = 0$ in π, ko kažejo molekule v smeri ureditvenega vektorja $\boldsymbol{n}$, najmanjša pa okrog pravokotne smeri ($\theta = \pi/2$). Z njo lahko računamo termodinamična povprečja v nematični fazi.

Klasična statistična mehanika pove, da lahko s potencialom (4.1) izrazimo porazdelitveno funkcijo $\rho(\cos\theta)$ kot

$$\rho(\cos\theta) = (1/Z)\, e^{-\beta U(\cos\theta)}, \tag{4.2}$$

$$Z = \int_0^1 d(\cos\theta)\, e^{-\beta U(\cos\theta)},$$

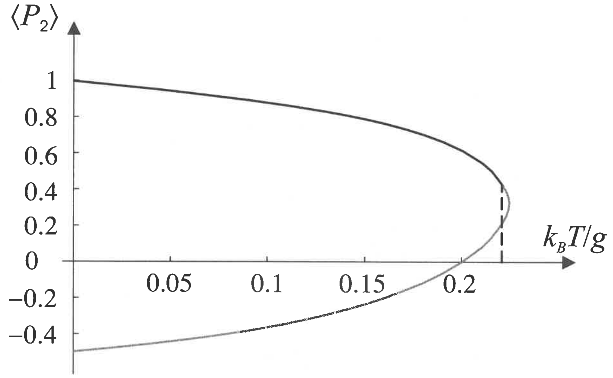
kjer je Z enodelčna statistična vsota in $\beta = 1/k_B T$ (k_B je Boltzmannova konstanta, T pa temperatura). Ker sta U in ρ sodi funkciji $\cos\theta$, smo lahko omejili integracijo na $0 \le \cos\theta \le 1$.

Vidimo, da nastopa v porazdelitveni funkciji $\rho(\cos\theta)$ parameter reda $\langle P_2 \rangle$, ki je za zdaj še neznana funkcija temperature. Parameter $\langle P_2 \rangle$ kot funkcijo temperature lahko določimo takole: $\langle P_2 \rangle$ je povprečje 2. Legendrovega polinoma. Zato lahko pišemo

$$\langle P_2 \rangle = \int_0^1 d(\cos\theta)\rho(\cos\theta)P_2(\cos\theta)\,. \tag{4.3}$$

Če to izpišemo in označimo $\mu = \cos\theta$, dobimo

$$\langle P_2 \rangle = \frac{\int_0^1 d\mu P_2(\mu) e^{\beta g \langle P_2 \rangle P_2(\mu)}}{\int_0^1 d\mu e^{\beta g \langle P_2 \rangle P_2(\mu)}}\,. \tag{4.3a}$$



Slika 7. Potek parametra reda $\langle P_2\rangle$ v odvisnosti od temperature T (oz. od $k_BT/g \propto T$) za prehod med izotropno in nematično fazo, kot ga dobimo iz samousklajene enačbe (4.3a). Nad temperaturo 0,22291 g/k_B je edina rešitev $\langle P_2\rangle = 0$, ki opisuje izotropno stanje. Pod temperaturo 0,22291 g/k_B imamo poleg rešitve $\langle P_2\rangle = 0$ še dve od nič različni rešitvi. Stabilno stanje opisuje tista rešitev, za katero ima prosta energija minimum. Za temperature nad kritično temperaturo $T_c = 0{,}22019\, g/k_B$ je stabilna rešitev $\langle P_2\rangle = 0$ (izotropna faza), za temperature pod T_c pa zgornja (pozitivna) veja (nematična faza).

Enačba (4.3a) je samousklajena enačba, iz katere lahko določimo temperaturno odvisnost parametra reda $\langle P_2\rangle$. Rešitev $\langle P_2\rangle = 0$ nastopa pri vseh temperaturah. To ustreza neurejeni, izotropni fazi. Slika 7 kaže $\langle P_2\rangle$ v odvisnosti od temperature. (Progam za rešitev enačbe (4.3a) je naveden v Dodatku.) Pri temperaturah nad 0,22291 g/k_B imamo eno samo rešitev, $\langle P_2\rangle = 0$. Pod 0,22291 g/k_B pa se pojavita še dve drugi rešitvi. Izmed treh rešitev ustreza stabilni fazi tista, za katero ima prosta energija minimum. Ko gremo proti absolutni ničli, gre ena od nič različnih rešitev (zgornja veja) proti vrednosti 1 in predstavlja nematično fazo; tedaj se skušajo vse molekule orientirati vzdolž ureditvenega vektorja. Druga od nič različna rešitev (spodnja veja) gre proti vrednosti $-\frac{1}{2}$, tj. molekule se skušajo urediti pravokotno na direktor brez azimutnega reda. Tudi ta faza ima cilindrično simetrijo, vendar je nestabilna glede na nematično urejanje molekul in je eksperimentalno niso opazili.

Da bi našli stabilno rešitev, izpeljimo izraz za prosto energijo, $F = W - TS_E$, pri čemer je W notranja energija, S_E pa entropija. Notranja energija sistema z N molekulami je

$$W = \frac{1}{2}N\langle U\rangle = \frac{1}{2}N\int_0^1 d(\cos\theta)\rho(\cos\theta)U(\cos\theta) = -\frac{1}{2}Ng\langle P_2\rangle^2. \qquad (4.4)$$

Faktor $\frac{1}{2}$ je potreben, da medmolekularnih interakcij ne štejemo dvakrat. Za entropijo dobimo (glej npr. [9], str. 135)

$$S_E = -Nk_B\langle \ln \rho \rangle = \frac{N\langle U \rangle}{T} + Nk_B \ln Z \tag{4.5}$$

in za prosto energijo

$$F = -Nk_B T \ln Z - \frac{1}{2} N \langle U \rangle \,. \tag{4.6}$$

Če to izrazimo s $\langle P_2 \rangle$, dobimo $F/N = -k_B T \ln\left(\int_0^1 d\mu e^{\beta g \langle P_2 \rangle P_2(\mu)}\right) + \frac{1}{2} g \langle P_2 \rangle^2$. Izmed treh rešitev enačbe (4.3a) za ureditveni parameter $\langle P_2 \rangle$ izberemo tisto, za katero ima F najmanjšo vrednost.

Opomba. O pravilnosti izraza (4.6) se prepričamo, če odvajamo F po $\langle P_2 \rangle$ in postavimo odvod enak nič; tako dobimo ravno enačbo (4.3a). To pomeni, da so samousklajene rešitve zares ravno tiste, ki ustrezajo minimumu proste energije.

Prosta energija za $\langle P_2 \rangle = 0$ je nič. Za zgornjo vejo ureditvenega parametra je prosta energija negativna do temperature $T_c = 0{,}22019\, g/k_B$, za temperaturni interval od T_c do $0{,}22291\, g/k_B$ je pozitivna. Za negativno vejo parametra reda je prosta energija negativna, a po velikosti manjša od F za pozitivno vejo. Pod T_c je torej stabilna nematična faza, nad T_c pa izotropna.

S slike 7 lahko razberemo oziroma iz enačbe (4.3a) izračunamo, da pade parameter reda $\langle P_2 \rangle$ pri prehodu iz nematične v izotropno fazo od vrednosti 0,429 tik pod T_c na vrednost nič. Tipične vrednosti kritične temperature (T_c) za prehod N–I so okoli 50 °C (npr. za MBBA je 47 °C, za 5CB je 36 °C). Če vzamemo $T_c = 320$ °C, dobimo $g/k_B = 1450$ K. Tipična sobna temperatura je tako $\sim 0{,}2\, g/k_B$. S slike 7 preberemo, da je tedaj pri sobni temperaturi ureditveni parameter $\sim 0{,}6$. Od te vrednosti se $\langle P_2 \rangle$ z naraščajočo temperaturo zmanjšuje do 0,429 pri temperaturi T_c, ko pade na nič. Ko tekoči kristal ohlajamo, se parameter reda veča. Vendar redko doseže (ali preseže) vrednosti $\sim 0{,}75$ [8], saj prej preide v kako drugo, pri nizkih temperaturah bolj stabilno fazo (smektično, kristalno).

Ocenimo še spremembo entropije in latentno toploto za prehod iz nematične v izotropno fazo, kakor ju da teorija povprečnega polja. Iz enačbe (4.5) dobimo za spremembo entropije pri prehodu N–I

$$\Delta S_E = -N\Big(\langle U \rangle_c / T_c + k_B \ln Z_c\Big) = -Nk_B\Big(-(g/k_B T_c)\langle P_2 \rangle_c^2 + \ln Z_c\Big). \tag{4.7}$$

Upoštevajmo, da je $T_c = 0{,}22019\, g/k_B$, $Z_c = \int\limits_0^1 \exp\left[g\langle P_2\rangle_c P_2(\mu)/k_B T_c\right] d\mu =$ 1,5185 ter da je $\langle P_2\rangle_c = 0{,}4289$, pa dobimo

$$\Delta S_E = 0{,}42\, N k_B = 0{,}42\,(m/M) R\,.$$

Izraženo nekoliko drugače je $\Delta S_E = 3{,}5$ kJ/kmol.

Latentna toplota, preračunana na enoto prostornine, je

$$q = \Delta h = T_c(0{,}42\, N k_B/V) = 0{,}42\, n k_B T_c = 0{,}42\,(m/M)(R T_c/V)\,,$$

preračunano na enoto mase pa

$$q_m = q(V/m) = 0{,}42\,(R T_c/M)\,.$$

Za tekoči kristal MBBA je $T_c = 320$ K in $M = 345$ kg, tako da je

$$q_m = 0{,}42\,(R T_c/M) = 3{,}5\ \mathrm{kJ/kg}\,.$$

Ker je gostota MBBA približno enaka kakor gostota vode, je $q = \rho q_m = 0{,}42\,(\rho R T_c/M) = 3{,}5\ \mathrm{MJ/m^3}$. Preračunano na kilomol je $q_M = 0{,}42\, R T_c =$ 1,1 MJ/kmol. V razdelku 4.3 smo dobili nekoliko manjše vrednosti, a istega reda velikosti. Glede na preprostost modelov nas razlike ne smejo presenetiti.

5. Sklep

V prispevku smo skušali na poljuden način predstaviti Landauovo teorijo povprečnega polja ter teorijo molekularnega potenciala ter ju uporabiti za opis faznega prehoda nematična–izotropna faza. Pri tem smo naredili podrobnejše izpeljave predvsem v pomoč tistim študentom, ki želijo dobiti osnovno informacijo o tej temi, pa se z obravnavano snovjo še niso imeli prilike srečati.

Dodatek

Z matematičnim paketom Mathematica brez težav numerično rešimo enačbo (4.3a)

$$\langle P_2\rangle = \frac{\int\limits_0^1 d\mu P_2(s) e^{\beta g\langle P_2\rangle P_2(s)}}{\int\limits_0^1 ds e^{\beta g\langle P_2\rangle P_2(s)}}\,. \tag{4.3a}$$

Označimo `x` $= \langle P_2\rangle$, `LegendreP[2,s]` $= P_2(s)$, `v[s,x]` $=$ `x LegendreP[2,s]` in `t` $= 1/\beta g = k_B T/g$, pa lahko zapišemo program za izračun $\langle P_2\rangle$ v odvisnosti od temperature:

```
xs[t_] := Module[{x},
   v[s_,x_] := x LegendreP[2,s];
   f[s_,x_] := Exp[ v[s,x]/t ];
   z[x_] := Integrate[ f[s,x], {s,0,1} ];
   av[x_] := Integrate[LegendreP[2,s] f[s,x], {s,0,1}]/z[x];
   FindRoot[ av[x] == x, {x,1/2} ]
   ];
Do[ Print[ t, xs[t] ], {t, 0.01, 0.22, 0.01} ]
```

Zahvala

Zahvaljujem se dr. Mariji Vilfan za skrbno branje rokopisa in številne koristne nasvete.

LITERATURA

[1] R. P. Feynman, R. B. Leighton in M. Sands, *The Feynman Lectures on Physics*, Vol. II, Addison-Wesley, Reading, Massachusetts 1966.

[2] C. Kittel, *Introduction to Solid State Physics*, J. Wiley, New York 1996.

[3] L. D. Landau in E. M. Lifshitz, *Statistical Physics I*, Pergamon Press, Oxford 1985.

[4] F. N. H. Robinson, *Electromagnetism*, Clarendon Press, Oxford 1973.

[5] P. G. de Gennes in J. Prost, *The Physics of Liquid Crystals*, Oxford Univesity Press, Oxford 1995.

[6] P. M. Chaikin in T. C. Lubensky, *Principles of condensed matter physics*, Cambridge University Press 1995.

[7] M. Jamšek-Vilfan, *Tekoči kristali*, Obzornik mat. fiz. **18** (1971), str. 65–80.

[8] M. Vilfan in I. Muševič, *Tekoči kristali*, DMFA–založništvo, Ljubljana 2002.

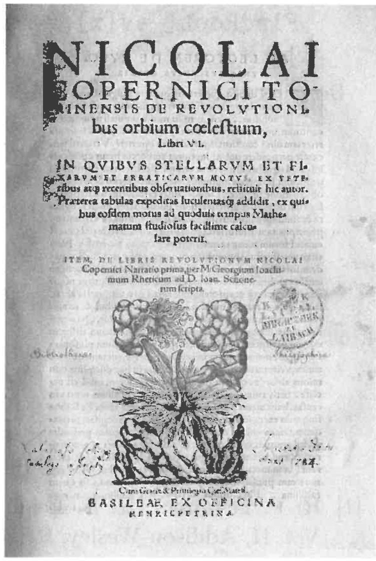
[9] I. Kuščer in S. Žumer, *Toplota*, DMFA in ZOTKS, Ljubljana 1987.

[10] J. Strnad, *Fizika*, I. del, DZS, Ljubljana 1977.

[11] W. Maier in A. Saupe, *Eine einfache molekulare Theorie des nematischen kristallinflussigen Zustandes*, Z. Naturf. **A13** (1958), str. 564–566.

[12] *Introduction to liquid crystals*, ed. E. B. Priestley, P. J. Wojnowicz in Ping Sheng, Plenum 1974.

V LJUBLJANI NAJDENA KOPERNIKOVA KNJIGA


NICOLAI COPERNICI TORINENSIS DE REVOLVTIONIbus orbium cœleſtium, Libri VI.

IN QVIBVS STELLARVM ET FIXARVM ET ERRATICARVM MOTVS, EX VETEribus atque recentibus obſeruationibus, reſtituit hic autor. Praeterea tabulas expeditas luculentasque addidit, ex quibus eoſdem motus ad quoduis tempus Mathematum ſtudioſus facillime calculare poterit.

ITEM, DE LIBRIS REVOLVTIONVM NICOLAI Copernici Narratio prima, per M. Georgium Ioachimum Rheticum ad D. Ioan. Schonerum ſcripta.

BASILEAE, EX OFFICINA HENRICPETRINA.

Kopernik (*De Revolutionibus Orbium Cœlestium*, Basel 1566) je pravzaprav „nova“ ljubljanska knjiga, ki nam je bila zaradi izjemnega spleta okoliščin dolga stoletja skrita. Pred skoraj dvesto leti je knjižničar Matija Čop namreč napačno vpisal njeno letnico izdaje, napaka pa je romala celo v sodobne kataloge. Štiristo štirideset let po natisu je ta zaklad zopet med nami in na voljo za preučevanje in ogledovanje v rokopisnem oddelku Narodne in univerzitetne knjižnice.

Nikolaj Kopernik (1473–1543) je objavil eno samo knjigo, vendar je prav z njo zaznamoval začetek moderne znanosti. Zato nam je v poseben ponos, da se je ta znamenita knjiga v drugi izdaji bržkone kmalu po natisu znašla v Ljubljani. Ohranjeni izvod izpričuje sicer lastniški vpis ljubljanskih jezuitov za leto 1754, ko je bil rojen poznejši jezuitski dijak Jurij Vega. Vendar je bila knjiga v lasti ljubljanskih jezuitov gotovo že veliko prej; seveda pa so vanjo vpisali svoj lastniški znak šele neposredno pred 16. 4. 1757, ko je Rimska kongregacija ob sodelovanju Ruđerja Boškovića umaknila prepoved „... vseh knjig, ki trdijo, da je Sonce pri miru in da se Zemlja giblje.“ S tem je bilo tudi Kopernikovo delo umaknjeno z indeksa. Nekaj dni po odločitvi kongregacije je rimski profesor matematike Bošković obiskal Ljubljano. Ponovno pa se je oglasil 9. 3. 1758, ko je tudi prespal pri ljubljanskih jezuitih, ter v začetku junija 1763. Tako so Ljubljančani sledili novim idejam iz prve roke.

Od tedaj naprej se Kopernikov nauk predava na ljubljanskih višjih šolah. Prvi izpit, naslovljen z opisom nebesnih pojavov po Kopernikovem nauku, je v Ljubljani izpričan za leto 1760.

Kandidata iz Ljubljane in iz Škofje Loke sta na javnem izpitu pri ljubljanskem jezuitskem profesorju fizike, baronu Inocencu Taufferju (1722 Turn pri Višnji Gori – 1794 Ljubljana), pred številnimi gledalci zagovarjala tezo, da naj bi bilo vesolje votla krogla, vrtljiva okrog svoje osi. Glede

XIX. Sonus ut est in corpore sonoro motum oscillatorium partium majorem, & anologum minorum tremorem requirit; ejus species certe oscillationum numero & intensione definitur; nec certo aere opus habet, sed propagatur in nostro aere ad sensum tempore æquali æquabiliter per superficies sphæricas, aut quasi sphæricas corpori sonoro concentricas. Lumen corporum lucidorum habetur in pulsibus ætheris rectilineis a vibrationibus partium subtilissimarum corporis lucidi effectis, quibus illa a centro ad peripheriam oscillant. Reflexio illius non fit a vi, ut vult Newtonus, superficiei corporis politæ insita, sed per ejus in ipsam impactum ad angulum incidentiæ æqualem. Refractio demum in medio densiore ad perpendiculum, & in rariore a perpendiculo motui oscillatorio radii luminosi non incongrue adscribitur. Diaphana denique corpora illa dicimus, quorum partes integrantes sunt ita dispositæ, ut & ipsa & æther in horum poris contentus impressionem a pulsibus ætheris exterioris recipere, & lineis rectis cum interioribus communicare, & transmittere possint.

Ex Physica Particulari.

XX. Mundus est compages ex cœlo terraque, & iis naturis, quæ in ea continentur, coagmentata, in genere suo perfecta, etsi omnimoda ejus perfectio intellectu non sit comprehensibilis. Quamvis præterea possibile sit, nulla tamen positiva ratione evinci potest, actu dari plures mundos præter hunc unicum, qui a Deo conditus est ex nihilo continuo sex dierum opere in tempore; & quidem respectu Mesopotamiæ, ubi paradysum olim terrestrem probabilius extitisse existimamus, circa æquinoctium autumnale.

XXI. De hujus amplitudine aut figura, quamvis nil certi statui possit, recte tamen ejus status apparens ad modum sphæræ cavæ, instar armillaris, in suos circulos divisæ, ac circa axem motæ proponitur. Quod si vero de ipso illius systemate, seu ordinata corporum præprimis cœlestium inter se dispositione sermo sit, hypothesim Capernicanam præ Tychonica multis difficultatibus implexa, ad explicandos astrorum motus & phænomena multo accommodatissimam adoptamus.

XXII In hac præter empyrium cælum, aliud stelliferum, aliud planetarium, apprime fluidum, & materia ætherea repletum, recte statuitur. In priori stellæ fixæ, quæ ob ingentem distantiam probabilius videntur corpora instar solis lucentia, præter motum vertiginis motu seu vero seu apparente circa polos ecclypticæ adeo lente moventur, ut non nisi juxta veteres & Cassinum intra 70.. juxta recentiores autem reliquos inter 72. annos unum gradum absolvant. Earum scin-

)( )(3 cil-

Enaindvajseta teza končnega izpita iz posebne fizike (Inocenc Taufferer: *Tentamen Publicum ex Universa Philosophia*, Ljubljana, Heptner, 1760).

sistema vesolja so sprejemali Kopernikovo hipotezo kot najprimernejšo za razlago pojavov in gibanja zvezd; domnevno težavnejši opis Tycha Braheja je romal v zaprašeni kot. Vrtenje Zemlje okrog Sonca ni bilo več zgolj za računanje udobna, a vendar napačna hipoteza.

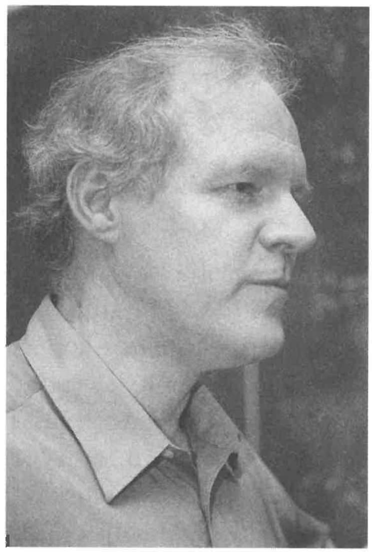
Kmalu po zagovoru pri Tauffererju je profesor matematike Janez Schöttl (1724–1777) dne 6. 6. 1761 v Ljubljani izjemno uspešno meril navidezen prehod Venere čez ploskev Sonca in je bil pohvaljen tako na Dunaju kot pri pariški akademiji. Nekaj let pozneje je Gabrijel Gruber med prvimi ljubljanskimi profesorji učil astronomskih opazovanj Jurija Vego in druge študente. Gruberjeva „brodarska“ šola je bila edina svoje vrste v habsburški monarhiji. Izobrazila je prve domače strokovnjake za astronomsko navigacijo in vojno pomorske oficirje. Pri pouku je seveda lahko uporabljal Kopernikovo knjigo, vendar je imel na razpolago še številne sodobnejše tiske.

Stanislav Južnič

MATEMATIČNE NOVICE

Bojan Mohar, ki je bil v letih 2003–2005 dekan Fakultete za matematiko in fiziko Univerze v Ljubljani, je zdaj na Univerzi Simon Fraser na zahodni kanadski obali blizu Vancouvra. Postal je *Canada Research Chair*, kar bi nekako prevedli kot *kanadski raziskovalni predstojnik*, njegovo mesto pa bi lahko označili kot *kanadska raziskovalna katedra*. Tovrstne pozicije velikodušno financira država, in sicer za dobo najmanj sedem let. Mesta so namenjena izjemnim raziskovalcem, ki jih njihovi kolegi priznavajo kot vodilne na svetu na njihovih področjih.

Profesor Mohar je za marčno številko revije *Notices of the American Mathematical Society* napisal članek za rubriko *Kaj je...*, ki pojasni kak zanimiv, a manj znan matematični pojem. Tokrat je to *minor grafa* [1].



Konec lanskega leta je bil pri nas kot gost skupine za kompleksno analizo na obisku profesor **Jean-Pierre Demailly**, direktor Inštituta Fourier Univerze v Grenoblu. Profesor Demailly je član Francoske akademije znanosti, zelo pa ga zanima tudi matematično izobraževanje. Kot mnogi raziskovalci je tudi on prepričan, da pogosto podcenjujemo sposobnosti učencev in dijakov. V Franciji je v zadnjem desetletju prišlo do znižanja nivoja pouka matematike [2]. Spomnimo se, da je bil zaradi ostrega nasprotovanja tem trendom prisiljen odstopiti iz francoskega Visokega sveta za šolstvo dobitnik Fieldsove medalje Laurent Lafforgue. (O tem škandalu je poročalo celo naše dnevno časopisje.) Profesor Demailly, ki je na začetku kariere sam učil na liceju, je v Franciji javno predlagal sam [3] in v družbi z najslavnejšimi matematiki [4] številne izboljšave na področju izobraževanja. V francoski osnovni šoli, ki poskuša na ne zmeraj posrečen način aplicirati nekatere abstraktne pedagoške prijeme, si želi vrnitev preverjenih načinov pouka računstva. Poudarja pomen pravopisa in zgodnjega učenja tujega jezika. Je velik zagovornik uporabe proste kode na področju računalništva. Tudi v Sloveniji se je želel seznaniti s poukom matematike. Na kratko smo ga seznanili s programom devetletke in gimnazije in dali smo mu dve verziji učbenika, ki obravnava odvod in integral v zadnjem razredu gimnazije. Pred kratkim je profesor Demailly odpisal naslednje:

> *Knjigi sem nesel na srečanje Francoskega matematičnega društva kot pričevanje, da še obstajajo države, v katerih so srednješolski matematični programi in učbeniki bogati in dobro organizirani. To je pripeljalo do članka, ki bo kmalu objavljen v Gazette des Mathématiques in v katerem je Slovenija omenjena kot ena od držav, ki si jih je vredno ogledati pri rekonstrukciji našega kurikula.*

Pri prenovi gimnazije se spomnimo na njegove besede in ohranimo prednosti, ki jih imamo.

Obsežni članek **Petra Šemrla** [5] je bil v zadnjem četrtletju leta 2005 med najbolj iskanimi prispevki v reviji *Linear Algebra and its Applications* [6]. Profesorja Šemrla je International Linear Algebra Society (ILAS) leta 2004 odlikovala tako, da je imel na srečanju tega društva v Coimbri na Portugalskem plenarno predavanje, ki nosi ime po Olgi Taussky in Johnu Toddu [7]. Tovrstno predavanje ima v njuno čast vsaka tri ali štiri leta matematik, ki je v zgodnjem obdobju kariere objavil pomembne rezultate na področju linearne algebre in matrične teorije. Iz tega predavanja je nastal omenjeni članek.

Nekateri novejši prispevki naših matematikov v monografijah

Janez Mrčun in Ieke Moerdijk sta za monografijo [8] prispevala poglavje *Lie groupoids, sheaves and cohomology.*

Tomaž Pisanski in **Primož Potočnik** sta za priročnik [9] napisala poglavje *Graphs on surfaces.*

Dušan Repovš in Pavel Vladimirovič Semenov sta za publikacijo [10] pripravila razdelek *Continuous selections of multivalued mappings.*

Bojan Mohar je za publikacijo [11] prispeval poglavje *Graph minors and graphs on surfaces.*

V knjigi [12], namenjeni širšemu občinstvu, sta **Tomaž Pisanski** in Milan Randić objavila prispevek *Bridges between geometry and graph theory.*

Gornji seznam skoraj gotovo ni popoln. Ene od prej navedenih monografij nimamo niti v Matematični knjižnici. Težko je tudi ločiti med monografijami in zborniki prispevkov na konferencah, v katerih imajo naši člani preveč člankov, da bi jih navajali tu.

Hvaležen bom, če me boste opozorili na večje dosežke naše matematike in poskrbeli, da ustrezna gradiva dobi Matematična knjižnica. Pri oddaji snovi za vpis v bibliografijo lahko predlagate Janezu Krušiču, da o tem obvesti tudi mene. Prav tako se priporočam za obveščanje o drugih novicah, zanimivih za slovenske matematike in matematiko nasploh. Zvedeli bi recimo radi za uspešne mentorje v osnovnih in srednjih šolah, posredovali obvestila o didaktičnih konferencah ali sejmih didaktične opreme, ki so zanimivi za učitelje matematike. Morda bi bralce zanimalo kratko poročilo o obisku take (zanimive) konference ali sejma.

Moj elektronski naslov je: Peter.Legisa@fmf.uni-lj.si .

LITERATURA

[1] B. Mohar, *What is... a Graph Minor*, Notices AMS **53** 3, marec 2006, str. 338–339, http://www.ams.org/notices/200603/what-is.pdf .

[2] *Jean-Pierre Demailly's Home Page*, http://www-fourier.ujf-grenoble.fr/~demailly/.

[3] Jean-Pierre Demailly, *Rapport sur l'enseignement des sciences et sur l'environnement de travail des enseignants et enseignants-chercheurs*, http://smf.emath.fr/Enseignement/TribuneLibre/Demailly-08-2001/Demailly-08-2001.pdf .

[4] R. Balian, J.-M. Bismut, A. Connes, J.-P. Demailly, L. Lafforgue, P. Lelong in J.-P. Serre, *Les savoirs fondamentaux au service de l'avenir scientifique et technique (Comment les réenseigner), Les Cahiers du débat*, Fondation pour l'innovation politique, november 2004, http://www.fondapol.org/pdf/SavoirsFondamentaux.pdf .

[5] P. Šemrl, *Maps on matrix spaces*, Linear Alg. Appl. **413** (2006) (Special Issue on the 11$^{\text{th}}$ Conference of the International Linear Algebra Society, Coimbra, 2004), str. 364–393.

[6] *ScienceDirect TOP25 Hottest Articles*, http://top25.sciencedirect.com/.

[7] *ILAS Special Lecturers*, http://www.math.technion.ac.il/iic/misc/lecturers.html .

[8] S. Gutt et al. (ur.), *Poisson geometry, deformation quantisation and group representations*, London Math. Soc. Lecture Note Series 323, Cambridge Univ. Press, Cambridge 2005.

[9] J. L. Gross in J. Yellen (ur.), *Handbook of graph theory*, CRC Press, Boca Raton 2004.

[10] M. Hušek in J. van Mill (ur.), *Recent progress in general topology 2*, North Holland, Amsterdam 2002.

[11] J. W. P. Hirschfeld (ur.), *Surveys in combinatorics, 2001*, London Math. Soc. Lecture Notes Series 288, Cambridge Univ. Press, Cambridge 2001.

[12] C. A. Gorini (ur.), *Geometry at work, A collection of papers showing applications of geometry*, MAA Notes 53, Math. Assoc. of America, Washington D. C. 2000.

Peter Legiša

Seznam diplomantov podiplomskega študija ter doktorandov iz matematike in fizike v letu 2004*

Pedagoška fakulteta Univerze v Mariboru

Magistrski študij – matematika

18. Ajda Fošner	Ohranjevalci obrnljivosti na Banachovih algebrah
19. Iztok Banič	Psevdolok
20. Mojca Suban Ambrož	Odometri
21. Špela Drstvenšek	Zapisovanje realnih števil v sistemih z neceloštevilskimi osnovami
22. Tadeja Kraner Šumenjak	Dualno tetivni grafi

Magistrski študij – fizika

3. Robert Šoster	Meritve zeta potenciala površin teflonskih in poliamidnih folij

Doktorati – matematika

9. Daniel Eremita	Posebne funkcijske identitete in sorodne teme
10. Maja Fošner	Asociativne superalgebre in jordanske strukture
11. Ciril Petr	Kombinatorika posplošenih Hanojskih stolpov

Fakulteta za matematiko in fiziko Univerze v Ljubljani

Specialistični študij – matematično izobraževanje (po programu ni naloge)

14. Sergej Kapus

Specialistični študij – fizikalno izobraževanje 1997–2004 (po programu ni naloge)

1. Nada Razpet	(1997)
2. Lidija Babič	(1997)
3. Vida Kariž	(1997)
4. Eda Okretič	(1997)
5. Loredana Sabaz Deranja	(1997)
6. Alenka Vengar	(1998)
7. Ruben Belina	(1998)
8. Stanislav Pirnat	(1998)
9. Mirjam Merljak Pirc	(1998)
10. Sonja Jejčič	(1998)
11. Borut Grošičar	(2004)
12. Vasja Kožuh	(2004)

Magistrski študij matematike – izobraževalna smer

29. Irena Bržan	Trikotniki z racionalnimi težiščnicami
30. Gregor Mohorčič	Ali lahko slišimo obliko bobna?

*Seznam diplomantov iz leta 2003 je bil objavljen v Obzorniku za matematiko in fiziko **51** (2004) 6.

Magistrski študij matematike – raziskovalna smer

125.	Polona Grešak	Orbitalne varietete
126.	Matjaž Konvalinka	Aproksimacijska lastnost
127.	Igor Klep	Pozitivni polinomi v realni algebraični geometriji
128.	Gregor Dolinar	Metoda preddoločanja in primeri njene uporabe v kombinatoriki
129.	Blaž Mojškerc	Submultiplikativne norme
130.	Boštjan Kuzman	Šibko kompaktni operatorji in vektorske mere

Magistrski študij fizike

192.	Loredana Sabaz Deranja	Teaching thermodynamics in the high school

Magistrski študij fizike – jedrska tehnika

36.	Tomaž Verk	Meritev doze na bolniku pri konformnem obsevanju
37.	Mitja Uršič	Določitev elementnih koncentracij v železotaninskih črnilih z metodo protonsko vzbujenih rentgenskih žarkov

Magistrski študij meteorologije 1983–2004

1.	Jelko Urbančič	Študij burje s pomočjo numeričnega modela (1983)
2.	Tanja Cegnar	Metoda objektivne prognoze lokalnega vremena v razgibanem reliefu (1988)
3.	Tomaž Vrhovec	Mezometeorološka analiza vetrovnih in temperaturnih polj (1988)
4.	Andrej Šegula Ilić	Model ozelenitve nekaterih drevesnih vrst v Sloveniji glede na meteorološke parametre okolja (1990)
5.	Neva Pristov	Začetna interpretacija za potrebe variacijske analize polja vetra (1995)
6.	Marjan Divjak	Radarsko merjenje padavin v neoptimalnih razmerah (1996)
7.	Saša Gaberšek	Vpliv spremembe albeda tal na nekatere meteorološke količnike (1996)
8.	Mark Žagar	Dinamična adaptacija za napoved vetra v majhni skali (1997)
9.	Gregor Gregorič	Simulacija nastanka in razvoja konvektivnih celic v ozračju (1999)
10.	Danijel Čemas	Ocena onesnaževanja s SO_2 pozimi nad Evropo zaradi izpustov iz TE Šoštanj (2001)
11.	Mateja Iršič Žibert	Analiza oblačnosti s pomočjo multispektralnih satelitskih slik druge generacije satelitov METEOSAT (2004)

Doktorati – matematika

77.	Helena Zakrajšek	Simbolno reševanje linearnih funkcijskih enačb v obliki polinomskih vrst
78.	Marko Boben	Uporaba teorije grafov pri kombinatoričnih in geometričnih konfiguracijah
79.	Matjaž Zaveršnik	Razčlembe omrežij
80.	Marjeta Kramar	Matrične grupe s submultiplikativnim spektrom

Doktorati – fizika

272. Jurij Kotar	Gravitacijski zakon na laboratorijskih razdaljah
273. Simon Vidrih	Optical pulsars and phase resolved photometry
274. Andrej Jeromen	Toplotne in magnetne raziskave regeneratorskega materiala TmZn za hladilnik s pulzno cevjo
275. Martin Klanjšek	Physical properties of icosahedral aluminium-based quasi-crystalline alloys
276. Zoran Arsov	Študij lateralne strukture bioloških membran z EPR
277. Marko Žnidarič	Stabilnost kvantne dinamike

Doktorati – jedrska tehnika

274. Radojko Jaćimović	Analiza uporabe reaktorja Triga Mark II za k_0-metodo aktivacijske analize
275. Igor Lengar	Dozimetrija hitrih nevtronov s koincidenčnim detektorjem jedrskih sledi CR-39

NOVI ČLANI DRUŠTVA V LETU 2005[†]

Lani se je v Društvo matematikov, fizikov in astronomov Slovenije včlanilo 55 novih članov:

2161. Bergant Merela Alenka
2162. Beznec Branko
2163. Božič Samo
2164. Bratina Gvido
2165. Bučinel Darja
2166. Car Mate
2167. Cimprič Aleš
2168. Cvetko Vah Karin
2169. Čas Branko
2170. Činej Loredana
2171. Dretnik Lovro
2172. Drobnič Vidic Andreja
2173. Fratina Saša
2174. Golež Denis
2175. Gorišek Andrej
2176. Herman Bojan
2177. Horvat Boris
2178. Ibrič Tibor
2179. Ivančič Matjaž
2180. Jančič Jasmina
2181. Karner Beno
2182. Kočar Stanka
2183. Kosi–Ulbl Irena
2184. Krmpotič Luka
2185. Kušar Barbara
2186. Malec Tina
2187. Matjašič Jerneja
2188. Movrin Miha
2189. Nardin Andrej
2190. Osovnik Marko
2191. Pahovnik Jana
2192. Peček Lea
2193. Pernar Jože
2194. Peternel Evgenija
2195. Petrovčič Maša
2196. Plevnik Lucijan
2197. Poljanšek Marjanca
2198. Primec Metka
2199. Ravnik Miha
2200. Remškar Maja
2201. Repnik Robert
2202. Roškar Franjo
2203. Stegel Simon
2204. Strelec Vasja
2205. Suban Ambrož Mojca
2206. Šolar Dalibor
2207. Špiletič Anica
2208. Šuligoj Nataša
2209. Tkalec Uroš
2210. Tolič Andrej
2211. Vidmar Karmen
2212. Vidmar Lev
2213. Vrtačič Romana
2214. Zanjkovič Tanja
2215. Žigert Adela

Vladimir Bensa

[†]Novi člani DMFA za leto 2004 so bili objavljeni v Obzorniku za matematiko in fiziko **52** (2005) 6, stran 181.

OBZORNIK ZA MATEMATIK
LJUBLJANA, MAJ 2
Letnik 53, številka
ISSN 0473–7466, UDK 51

VSEBINA

CONTENTS

Na naslovnici je Kopernikova knjiga iz leta 1566 v ljubljanski Narodni in univerzitetni knjižnici; prva izdaja je izšla v Nürnbergu 23 let prej (glej prispevek na strani 90).