

EFEITOS DE CAMPOS ELÉTRICOS DE SUPERFÍCIE EM CRISTAIS LÍQUIDOS NEMÁTICOS: O PAPEL DA FUNÇÃO HIPERGEOMÉTRICA

Milena Camila Fernandes (PIBIC/CNPq/FA/Uem), Luiz Roberto Evangelista (Orientador), e-mail: lre@dfi.uem.br.

Universidade Estadual de Maringá / Centro de Ciências Exatas/Maringá, PR.

Área/subárea: Ciências Exatas e da Terra/Física.

Palavras-chave: adsorção iônica, cristal líquido, função hipergeométrica.

Resumo

O meio nemático possui impurezas contendo íons, e, devido a forças eletroquímicas, as superfícies que limitam a amostra adsorvem um tipo de íon (por exemplo, os positivos). Esse fenômeno dá origem a um campo elétrico – com gradiente intenso nas vizinhanças da superfície – que é responsável pela mudança da orientação molecular. Neste trabalho, investigamos as instabilidades orientacionais induzidas na amostra líquido-cristalina por esse campo de superfície, levando em conta as contribuições dielétrica e flexoeétrica à densidade de energia elástica total. O perfil de equilíbrio do diretor da fase nemática é investigado por meio de técnicas variacionais. Mostramos que a equação diferencial que governa o comportamento espacial do ângulo do diretor pode ser resolvida analiticamente, e a solução pode ser expressa em termos de funções hipergeométricas.

Introdução

Quando uma amostra de cristal líquido nemático (CLN) estiver em seu estado fundamental, ela terá uma energia mínima inicial. Após uma certa perturbação na amostra, a energia terá um acréscimo que deverá ser adicionado à energia total. À esta energia total, que provém do aumento devido à perturbação, chamamos de densidade de energia elástica de Frank; ela representa a densidade de energia de uma amostra de cristal líquido deformado. Esta expressão é diretamente dependente das constantes K_{11} , K_{22} , K_{33} e K_{24} que são as constantes elásticas *splay*, *twist*, *bend* e *saddle-splay*, respectivamente, e estão ligadas ao tipo de distorção que acontece no meio nemático [1].

Se a amostra estiver confinada entre duas placas, tratadas de modo a assegurar um alinhamento uniforme, também teremos uma contribuição de superfície na densidade de energia total. Além disso, a presença de impurezas iônicas na amostra resulta em íons adsorvidos seletivamente pela superfície, dando origem a um campo elétrico ao longo da direção normal à

superfície. Em consequência, um adicional à densidade de energia total deve ser considerado, denominadas contribuições dielétricas e flexoeletricas [1]. A adsorção seletiva de íons em uma amostra gera, no interior desta, um campo elétrico, muito forte na superfície e que diminui de intensidade à medida que penetra no volume. Tipicamente, a distância na qual esses efeitos são importantes é λ_d , isto é, o comprimento de Debye [2].

Revisão de literatura

O sistema considerado é uma amostra de CLN confinado entre duas placas tratadas para assegurar um alinhamento homeotrópico, como ilustra a figura 1.

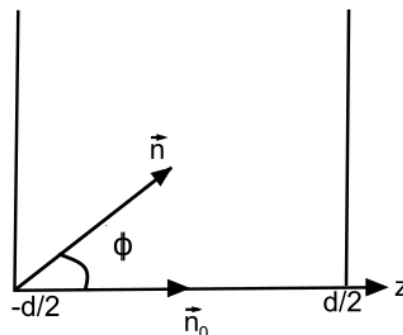


Figura 1 – Amostra de CLN entre duas placas de espessura d , na qual o ângulo considerado está entre o vetor diretor e o eixo z , que contém o eixo fácil da amostra.

A densidade de energia livre é dada por

$$f = \frac{1}{2} K \phi'^2(z) - \frac{\epsilon_a}{8\pi} E^2(z) \cos^2[\phi(z)] - \frac{e}{2} \sin[2\phi(z)] \phi'(z) E(z).$$

Uma aproximação para as constantes foi feita pois, na presença de distorções do tipo *splay-bend* e nas vizinhanças do campo crítico, apenas a constante $K_{33} = K$ é relevante [2]. A contribuição de superfície será

$$f_s = -\frac{1}{2} W \cos^2 \phi_1 - \frac{1}{2} W \cos^2 \phi_2,$$

em que $\phi_1(z)$ é o ângulo entre a superfície em $z = -d/2$ e o vetor diretor e $\phi_2(z)$, o ângulo em $z = +d/2$.

A energia total por unidade de área será formada pela soma de todas as contribuições à densidade de energia livre, integrada ao longo de toda a espessura da amostra, acrescida da energia presente nas duas superfícies. O que buscamos determinar é o perfil de equilíbrio do diretor dado por $\phi(z)$ e, para isto, precisamos encontrar a solução para a equação de Euler-Lagrange, linearizada, como segue [2]:

$$K \phi''(z) - \frac{\epsilon_a}{4\pi} E^2(z) \phi(z) - e E'(z) \phi(z) = 0. \quad (1)$$

A solução deve satisfazer às seguintes condições de contorno:

$$\left[\frac{d\phi}{dz} \right]_{\pm d/2} \pm \left(\frac{W}{K} + \frac{eE(\pm d/2)}{K} \right) \phi(\pm d/2) = 0.$$

O campo elétrico para este problema é bem representado por [2]

$$E(z) = \alpha \tan \left[\frac{\beta \pi z}{2} \right], \quad (2)$$

onde

$$\alpha = -4 \frac{k_b T}{q d} t[\psi_s, \psi_0], \beta = \frac{2}{\pi} t[\psi_s, \psi_0], t[\psi_s, \psi_0] = \frac{d}{4L} \exp[(\mu - \Delta + \psi_0)/2],$$

em que os parâmetros L, Δ e μ , além de ψ_0 e ψ_s caracterizam a distribuição de cargas e potenciais elétricos na amostra, definidos na Ref. [2].

Resultados e Discussão

O campo elétrico é gerado devido à adsorção iônica e responsável por produzir instabilidades na amostra. O objetivo é procurar soluções para a Eq. (1) utilizando o campo considerado pela Eq. (2) e analisar que tipo de instabilidade este campo produz. A Eq. (1) é reescrita como [2]

$$\Phi'' + \left[R_2 - \frac{R_1 + R_2}{\cos^2(Zt)} \right] \Phi = 0, \quad (3)$$

na qual foi realizada uma nova notação em que $z = Zd/2$, com

$$R_1 = - \left(\frac{k_b T}{q} \right) \frac{e t^2}{K}, R_2 = \left(\frac{k_b T}{q} \right) \frac{e_g t^2}{\pi K}.$$

Fazendo agora uma transformação de variável, em que $y = \sin^2(tZ)$, a Eq. (3) torna-se:

$$y(1-y)\Phi''(y) + \left(\frac{1}{2} - y \right) \Phi'(y) + \frac{1}{4} \left(\frac{k^2}{t^2} - \frac{\lambda(\lambda-1)}{1-y} \right) \Phi(y) = 0, \quad (5)$$

$$\text{onde } k^2 = R_2 \quad \text{e } \lambda = \frac{1}{2} \left[1 + \sqrt{1 + \frac{4(R_1 + R_2)}{t^2}} \right].$$

Consideremos uma nova transformação $\Phi = (1-y)^{\lambda/2} u(y)$, de modo que a Eq. (5) transforma-se em uma equação diferencial hipergeométrica [3], da forma

$$2(y-1)yu''(y) - 2t^2(1-2(1-\lambda)y)u'(y) - (k^2 - \lambda^2 t^2)u(y) = 0,$$

cujas soluções podem ser escritas na forma

$$u(y) = C_1 F_1[a+1-c, b+1-c, 2-c, y] + i C_2 \sqrt{y} F_2(a, b, c, y), \quad (6)$$

e os coeficientes são

$$a = \frac{1}{2} \left(\lambda - \frac{k}{t} \right), \quad b = \frac{1}{2} \left(\lambda + \frac{k}{t} \right) \quad \text{e} \quad c = \frac{1}{2}.$$

A Eq. (6) é composta pelas funções hipergeométricas confluentes F_1 e F_2 , conhecidas também pelo nome de Função de Kummer, soluções da equação hipergeométrica confluyente [3].

De acordo com a transformação realizada para o eixo z , o intervalo agora será $-1 < Z < 1$ e o segundo termo da Eq. (6) será imaginário. Essa consideração permite escolher $C_2 = 0$ e a solução geral se reduz à forma

$$\Phi(y) = C_1 (1-y)^{\lambda/2} F_1[a+1-c, b+1-c, 2-c, y],$$

com a série hipergeométrica a ser considerada como [3]

$$F_1(p, q, v, y) = 1 + \frac{p q}{v} y + \frac{p(p+1)q(q+1)}{v(v+1)} \frac{y^2}{2!} + \dots$$

Com este resultado, é possível analisar os campos críticos responsáveis pelas instabilidades. Neste caso, podemos obter uma expressão para o campo na parede da amostra. Para $z = -d/2$, temos

$$E_0 = \frac{4Kd}{e} \left[\frac{\Phi'(z)}{\Phi(z)} \right]_{z=-1} - \frac{W}{e} \quad (7)$$

Esta expressão define o valor do campo para o surgimento da instabilidade, ou seja, o campo crítico e, por consequência, a voltagem crítica $V_{th} = E_{th} d$, sendo E_{th} o campo crítico. Ela depende da energia de ancoramento, W , e do coeficiente flexoeletrico, e . A Eq. (7) fornece a voltagem crítica exata no limite em que $d \gg \lambda_d$ e sua dependência com a energia de adsorção A e com a espessura d da amostra [2].

Conclusões

Neste trabalho é considerado o surgimento de um campo elétrico de superfície devido à adsorção iônica numa amostra de cristal líquido nemático. As instabilidades em razão do campo elétrico são analisadas considerando um campo exato e, com isso, é possível encontrar uma expressão para o ângulo de equilíbrio $\phi(z)$ cuja solução geral é dada em termos de uma série hipergeométrica. A partir disso, foi encontrada a expressão para o campo crítico, na parede da amostra, responsável pelo surgimento da instabilidade, além da voltagem crítica e, por fim, mostrar que esta voltagem é dependente da energia de adsorção da amostra e, também, da sua espessura.

Agradecimentos

Ao CNPq, pelo apoio financeiro.

Referências

- [1] Barbero, G., Evangelista, L. R., **An elementary course on the continuum theory for nematic liquid crystals**. Singapore: World Scientific, 2001.
- [2] Pereira, H. A. **Efeito da adsorção iônica seletiva na energia de ancoramento e na orientação molecular de cristais líquidos nemáticos**. 2003. Tese (Doutorado)-Programa de Pós-Graduação em Física, Universidade Estadual de Maringá, Maringá, 2003.
- [3] Morse P., Feshbach M., H. **Methods of Theoretical Physics**. New York: Mc-Graw-Hill, 1953.