

ESTUDO DE DEFEITOS TOPOLÓGICOS EM SISTEMA LÍQUIDO CRISTALINO

Leonardo Gabriel José Mendes Voltarelli (PIBIC/CNPq/FA/Uem),
Hatsumi Mukai (Orientadora), Breno Ferraz de Oliveira (Coorientador),
e-mail: leonardogabriel07@hotmail.com.

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

Ciências Exatas e da Terra-Física.

Palavras-chave: cristal líquido, defeito topológico, cálculo numérico

Resumo: Em um sistema líquido cristalino a transição da fase isotrópica para nemática pode, em certas condições, produzir defeitos topológicos devido a sua quebra de simetria. O modelo de Landau-de Gennes descreve essa transição de fase usando um parâmetro de ordem tensorial, e a equação de Beris-Edward fornece a dinâmica desse parâmetro. Utilizou-se o cálculo numérico para resolução de tal equação obtendo o programa LICRA (*Liquid Crystal Alghoritm*) (DE OLIVEIRA, 2012) que possibilitou obter a simulação de uma textura (defeitos topológicos) de um sistema líquido cristalino em sua fase nemática. Como resultados apresenta-se a textura obtida, bem como os gráficos referentes a variação dos graus de ordenamento uniaxial e biaxial, perto do defeito, para diferentes valores das constantes elásticas.

Introdução

Os cristais líquidos são materiais que possuem uma fase cuja principal propriedade é fluir como um fluido isotrópico e, possuir ordenamento de suas moléculas semelhante à de um cristal, sendo assim, possui ao mesmo tempo propriedades de líquido e de um cristal como o nome sugere. A fase isotrópica, em um cristal líquido, é aquela na qual suas moléculas não estão dispostas em uma direção privilegiada, pelo contrário, apontam em direções aleatórias. Experimentalmente quando esta fase é submetida a uma variação de temperatura, sofre uma transição para fase nemática surgindo assim, os defeitos topológicos devido à quebra de simetria da fase isotrópica. No entanto, esses defeitos sempre aparecem aos pares, com cargas topológicas diferentes, e em um tempo muito longo se anulam (princípio da conservação de cargas).

Tais defeitos podem ser encontrados em outros sistemas da matéria condensada como hélio superfluido e grafeno. Já no âmbito da Cosmologia, alguns modelos cosmológicos prevêm a existência de defeitos topológicos no Universo Primordial. Acredita-se que esses foram gerados a partir da quebra de simetria que se dá devido a transições de fase que o Universo passou logo após o *Big-Bang*. Há uma grande similaridade (DE OLIVEIRA, 2012) entre os defeitos observados em sistemas da matéria condensada e àquelas no Universo Primordial, e isto se deve ao fato de matematicamente possuir a mesma topologia.

Revisão da Literatura

Os Cristais Líquidos são compostos por moléculas anisométricas, ou seja, que tem uma dimensão muito maior que outro fazendo com que sua direção altere as propriedades físicas do material. E, o estado líquido cristalino é uma mesofase entre o sólido cristalino e o líquido isotrópico possuindo propriedades de birrefringência de um cristal e a fluidez de um líquido.

Esses materiais cuja transição de fase é obtida puramente a partir de processos térmicos são denominados de cristais líquidos termotrópicos (CLTs) e são constituídos por moléculas orgânicas. E, são denominados de Cristais Líquidos Liotrópicos (CLLs) aqueles constituídos por micelas e cuja transição de fase ocorre principalmente pela variação da concentração relativa de seus constituintes, também transita pela variação da temperatura e em menor grau pela pressão. Tais materiais possuem variados formatos de moléculas como cilindros, discos e até mesmo em formato de banana. Suas mesofases são classificadas de acordo com a dimensionalidade das correlações translacionais de seus constituintes básicos (moléculas ou micelas).

No presente trabalho, foi estudada a fase nemática que é definida por possuir uma ordem orientacional representada pelo vetor diretor e possui uma ordem translacional de curto alcance (o centro de gravidade de suas moléculas apresenta fraca correlação, devido a fluidez da fase). Sendo que, o vetor diretor é apenas uma média das direções dos eixos ópticos das moléculas, ele não fornece informações sobre a dispersão das moléculas. Por isso, é necessário um parâmetro de ordem uniaxial, que fornece o grau de alinhamento em relação ao diretor. As moléculas ainda podem se organizar de tal modo a criar uma segunda direção privilegiada representada por um vetor codiretor e seu grau de alinhamento com relação ao vetor codiretor é o parâmetro de ordem biaxial (DE OLIVEIRA, 2012).

Portanto, o parâmetro de ordem tensorial é uma lista multidimensional constituída pelo: diretor, codiretor, parâmetro de ordem uniaxial e o biaxial. Quando um estado não-homogêneo não pode se transformar em um estado homogêneo a partir de uma variação contínua do parâmetro de ordem, ele é dito topologicamente estável, ou, um defeito topológico. Esses podem conter singularidades ou não, no caso de possuírem, apresentam uma região onde o parâmetro de ordem não está definido (KLEMAN, 2003).

O modelo fenomenológico de Landau - de Gennes descreve uma transição da fase isotrópica para a nemática e vice-versa, em que as energias livres são desenvolvidas em função de um parâmetro de ordem tensorial. O deslocamento espacial do vetor diretor gera uma energia que aumenta proporcional ao quadrado do deslocamento. Essa energia livre é representada por uma expansão em termos do quadrado da variação do diretor, sendo que, suas constantes multiplicativas L1, L2 e L3 são os parâmetros elásticos e podem ser interpretados como uma interação intermolecular (RAVNIK, 2009). Existem outras energias livres necessárias para descrição de um cristal líquido, no entanto, foi usada apenas essas duas, pois foi

feito um estudo no volume (*bulk*) na ausência de campo eletromagnético e efeitos de superfície.

A dinâmica do parâmetro de ordem tensorial dada pela equação de Beris-Edwards é exatamente a que o programa LICRA simula. Ele resolve as derivadas espaciais usando método de diferença finita e a parte temporal da equação é resolvida pelo método de Runge-Kutta de segunda ordem que basicamente consiste em aproximar um intervalo de uma função por uma reta, sendo que, sua precisão está fundamentalmente ligado ao tamanho do intervalo que se deseja calcular.

Resultados e Discussão

Usando o LICRA foi simulada uma rede bidimensional quadrada com condição de borda periódica em que o diretor poderia sair do plano. Foram utilizados os parâmetros do cristal líquido termotrópico MBBA (4-methoxybenzylidene-4-butylaniline).

Experimentalmente obtêm-se defeitos topológicos a partir da transição da fase isotrópica para a nemática por meio de uma rápida variação da temperatura (*quench*) que não ocorre imediatamente (da ordem, de segundos a minutos em CLTs e até horas em CLLs). Nesse período, são formados pequenos domínios nemáticos que possuem diferentes orientações e tendem a aumentar seu tamanho e coalescer, isto é, tendem a se juntar. É justamente na junção desses domínios é que surgem os defeitos topológicos. Ao observar tal transição, de uma amostra bidimensional, usando Microscopia Óptica de Luz Polarizada obtém-se a textura *Schlieren* (DE OLIVEIRA, 2012). Na finalidade de obter tal textura por meio de uma simulação (via cálculo numérico) onde a condição inicial usada foi a de que os diretores estavam orientados aleatoriamente representando a fase isotrópica, após um tempo formou-se os defeitos (manchas escuras se encontrando em um ponto) como mostra o ponto circulado em azul na Figura (1).

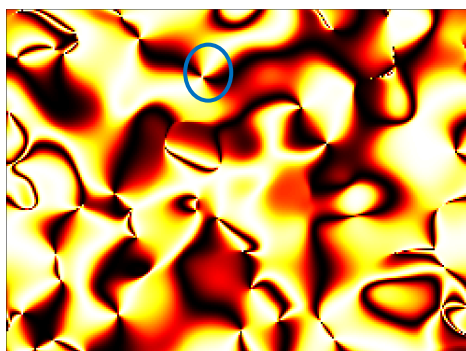


Figura 1 – Imagem do resultado da simulação de uma textura *Schlieren* usando o LICRA (*Liquid Crystal Algoritm*). E, circulado em azul um defeito do tipo $\frac{1}{2}$.

Em seguida, foi simulado uma rede com apenas um defeito topológico do tipo $+1/2$, exatamente no meio da rede. Tais tipos de defeitos possuem um núcleo isotrópico devido ao fato do parâmetro de ordem uniaxial ter valor reduzido a quase zero no núcleo (SCHÖPOHL, 1987). A partir de tal simulação calculou-se a variação do

parâmetro de ordem uniaxial e biaxial de uma linha horizontal (x) que passa no centro do defeito, tal procedimento foi feito para diferentes valores de parâmetros elásticos ($L1$, $L2$ e $L3$) apresentado nas Figuras 2 (a) e 2(b)).

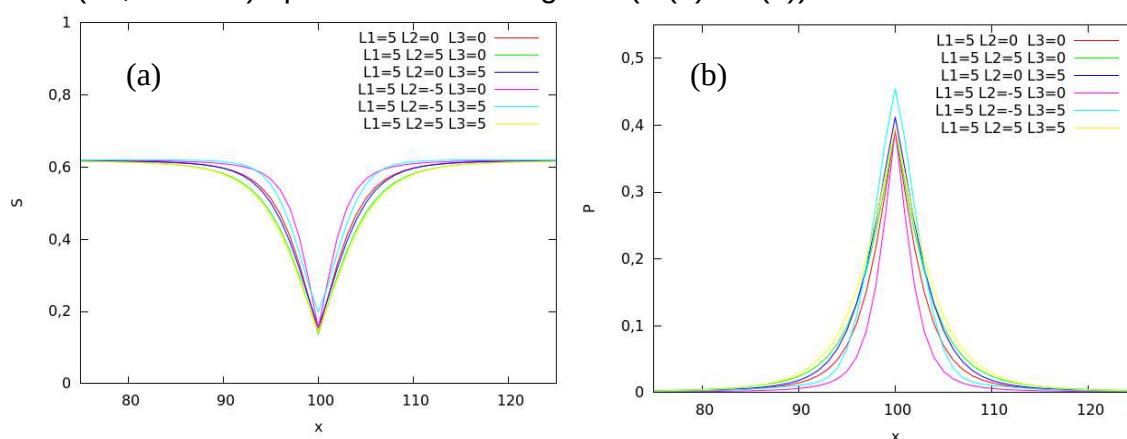


Figura 2 – Gráficos do parâmetro de ordem (a) uniaxial S e (b) biaxial P de uma linha horizontal (x) que passa no centro do defeito para diferentes valores dos parâmetros elásticos: $L1$, $L2$, e $L3$.

Conclusões

Assim como esperado, ao simular as equações da dinâmica do parâmetro de ordem tensorial, foi reproduzido o obtido na ref. DE OLIVEIRA, 2012, a textura *Schlieren*. Ao variar os parâmetros elásticos de uma rede com um defeito topológico de carga semi-inteira positiva observou-se uma variação nos parâmetros de ordem uniaxiais e biaxiais perto do defeito, sendo assim o raio do núcleo do defeito possui uma dependência com os parâmetros elásticos.

Agradecimentos

Ao CNPq, Fundação Araucária e UEM pelo auxílio financeiro.

Referências

DE OLIVEIRA, B. F. **Estudos numéricos da formação e dinâmica de defeitos topológicos em cristais líquidos nemáticos**. 2012. 126f. Tese de Doutorado, Universidade Federal da Paraíba, Maringá, 2012.

KLEMAN, M. and LAVRETOVICH, O. D., **Soft Matter Physics: An Introduction**, Springer, 2003.

RAVNIK, M., **Colloidal structures confined to thin nematic layers**. 2009. 141f. PhD thesis, University of Ljubljana, Ljubljana, Slovenia, 2009.

SCHOPOHL, N. and SLUCKIN, T. J., Defect core structure in nematic crystals. **Physical Review Letters**, vol. 59, pp. 2582-2584, 1987.