

VARIAÇÃO DOS PARÂMETROS ELÁSTICOS EM CRISTAIS LÍQUIDOS NEMÁTICOS

Vítor Hugo Ribeiro (UEM), Breno Ferraz de Oliveira (Orientador), e-mail: breno@dfi.uem.br.

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

FÍSICA / FÍSICA DA MATÉRIA CONDENSADA

Palavras-chave: densidade de energia, defeitos topológicos, modelo de landau-de gennes

Resumo:

Este trabalho teve como objetivo a análise dos efeitos causados pela variação dos parâmetros elásticos da densidade de energia elástica em um cristal líquido do tipo nemático. Ao caracterizar a mesofase da matéria nomeada de Cristal Líquido, utilizou-se das relações de densidade de energia para descrever o volume de uma amostra e avaliar a evolução temporal dos vetores diretores com base em estudos numéricos e computacionais. Como foco das análises, observou-se o comportamento apresentado pelos defeitos topológicos do tipo $+1/2$ e $-1/2$, bem como de um *slab* de cristal líquido, comparando os resultados obtidos e observando as dependências para com os valores dos parâmetros.

Introdução

Desde os anos iniciais de estudo, é ensinado que a matéria existe em três estados físicos, sendo eles sólido, líquido e gasoso. No entanto essa informação está incompleta. Existem materiais que apresentam características únicas em determinado estado termodinâmico, o que pode ser classificado como uma nova fase da matéria. Para alguns materiais orgânicos, por exemplo, não há uma transição de fase única do estado sólido para o líquido, sendo que tal mudança é marcada por várias transições entre novas fases. O termo Cristal Líquido é o nome atribuído a um desses novos estados da matéria, em que suas propriedades mecânicas e de simetria estão ligadas tanto ao estado de sólido cristalino quanto ao de líquido isotrópico [1].

Nesse contexto, os cristais líquidos representam um mesoestado da matéria, podendo fluir como líquidos e ainda assim apresentar características de cristais [2]. Dessa forma, eles caracterizam um material que possui diversas aplicabilidades e que apresenta um campo de estudo multidisciplinar, requisitando conceitos e técnicas da química, física e também, em alguns casos, relacionando a matemática, biologia e engenharias [3].

Materiais e métodos

Uma das características mais importantes de um cristal líquido é o seu padrão de ordenamento, que devido a forte anisotropia apresentada por seus constituintes moleculares, faz com que exista uma tendência de os mesmos se orientarem seguindo um eixo preferencial que é indicado através de um vetor \mathbf{n} , chamado diretor. Além disso, para moléculas que apresentam duas direções privilegiadas de orientação, ou na presença de campos, utiliza-se também um segundo vetor \mathbf{l} chamado codiretor para descrevê-las. A partir destes indicadores orientacionais são definidos três parâmetros essenciais para o estudo e descrição matemática de um cristal líquido, sendo dois deles de ordem escalar (S e P) e o terceiro de ordem tensorial (Q_{ij}) tal que [4]

$$Q_{ij} = \frac{1}{2}S(3n_i n_j - \delta_{ij}) + \frac{1}{2}P(l_i l_j - m_i m_j). \quad (1)$$

O parâmetro de ordem tensorial é o principal parâmetro utilizado na descrição das energias de um sistema líquido cristalino, de forma que levando em consideração pequenas variações, pode-se utilizar a seguinte equação como forma de avaliar sua evolução no tempo [4]

$$\frac{1}{\Lambda} \frac{\partial}{\partial t} \tilde{Q}_{ij} = -\Gamma_{ijkl} \frac{\delta \tilde{\mathcal{F}}_T}{\delta \tilde{Q}_{kl}}, \quad (2)$$

Nesse contexto, aplicou-se a equação (2) nos objetos de estudo definidos como sendo defeitos topológicos do tipo +1/2 e -1/2, bem como sobre um *slab* de cristal líquido. Variou-se também os parâmetros elásticos L_2 , L_3 e L_q pertencentes a componente da densidade da energia elástica, analisando todas as combinações possíveis entre eles de acordo com os valores expressos na Tabela 1.

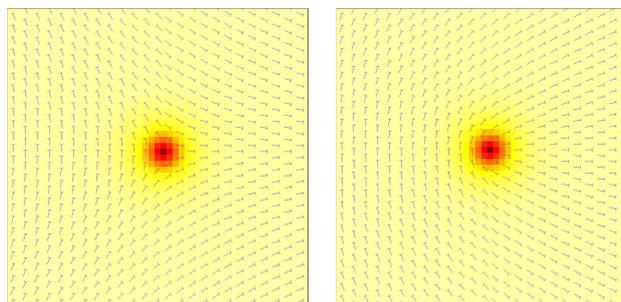


Figura 1 – Representação esquemática dos defeitos topológicos do tipo -1/2 à esquerda e +1/2 à direita.

Tabela 1 – Valores dos parâmetros elásticos

| | | | | | |
|-------|------|------|-----|-----|-----|
| L_2 | -5,0 | -2,5 | 0,0 | 2,5 | 5,0 |
| L_3 | -5,0 | -2,5 | 0,0 | 2,5 | 5,0 |
| L_q | 0,0 | 2,5 | 5,0 | | |

$$\mathcal{F}_{el} = \frac{1}{2}\mathcal{L}_1 Q_{ij,k} Q_{ij,k} + \frac{1}{2}\mathcal{L}_2 Q_{ij,j} Q_{ik,k} + \frac{1}{2}\mathcal{L}_S Q_{ij,k} Q_{ik,j} + \frac{1}{2}\mathcal{L}_3 Q_{ij} Q_{kl,i} Q_{kl,j} + \mathcal{L}_q (2q_0 \epsilon_{ijk} Q_{ij} Q_{lk,j})$$

(3)

A equação (2) para a dinâmica do parâmetro Q_{ij} , foi então resolvida utilizando-se a equação (3), do método de diferença finita para calcular as derivadas espaciais e do método de Runge-Kutta de segunda ordem para resolver as derivadas temporais. Tais métodos foram implementados computacionalmente utilizando a linguagem de programação C através do software LICRA para simulações de sistemas líquido cristalinos.

Resultados e Discussão

Os resultados obtidos dos cálculos considerando as variações para com os parâmetros elásticos na densidade de energia elástica, apresentaram três comportamentos específicos quanto a dinâmica dos defeitos topológicos analisados, sendo eles: a movimentação dos defeitos, variação no tamanho do defeito e mudanças na forma do defeito.

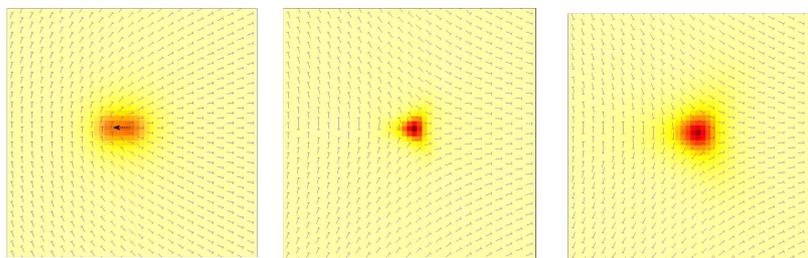


Figura 2 – Representação dos resultados obtidos. À esquerda, a movimentação do defeito topológico, ao centro sua geometria triangular observada e à direita o incremento em seu tamanho.

No caso de um volume de cristal líquido, todos os efeitos observados para os defeitos topológicos individualmente também foram vistos na amostra que

continha vários defeitos. Constatou-se que em uma aproximação para o parâmetro elástico L_1 , a variação dos parâmetros em (3) acaba por criar um efeito de *zoom* sobre certa região da amostra, aumentando o tamanho dos defeitos e diminuindo sua quantidade, bem como aumentando a velocidade de movimentação dos mesmos. Para além disso, não foi possível observar de maneira clara qualquer padrão para a dinâmica de um *slab* que apresenta um conjunto de vários defeitos topológicos.

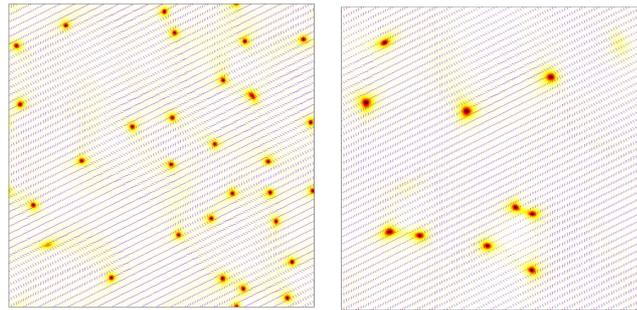


Figura 3 – Representação dos resultados obtidos para um *slab* de um cristal líquido. À esquerda, uma imagem com vários defeitos, enquanto à direita tem-se menos defeitos de tamanho maior, representando uma espécie de ampliação da imagem à esquerda.

Conclusões

A partir dos resultados gerados na análise da dinâmica de um cristal líquido, constatou-se que a variação dos parâmetros elásticos da densidade de energia elástica influencia diretamente e de forma expressiva na dinâmica de movimentação, tamanho e forma dos defeitos topológicos que aparecem. Ainda, no caso de uma amostra volumétrica, constatou-se que tais parâmetros estão ligados a quantidade de defeitos presentes, bem como na velocidade de aniquilamento dos defeitos com cargas topológicas opostas.

Agradecimentos

Agradeço ao CNPq pela oportunidade de realizar o projeto e ao professor Breno Ferraz de Oliveira pela orientação e encaminhamento ao longo de toda a pesquisa.

Referências

- [1] J. PROST and P. G. DE GENNES. **The physics of liquid crystals**. 2. ed. New York: Oxford University Press, 1993.
- [2] I. C. KHOO. **Liquid Crystals**. 2. ed. Hoboken, New Jersey: Wiley-Interscience. 2007.
- [3] M. HIRD and P. J. COLLINGS. **Introduction to Liquid Crystals Chemistry and Physics**. 1. Ed. London: Taylor & Francis Ltd, 1997.

[4] DE OLIVEIRA, B. F. **Estudos numéricos da formação e dinâmica de defeitos topológicos em cristais líquidos nemáticos.** 2012. Tese (Doutorado) – Programa de Pós Graduação em Física, Universidade Federal da Paraíba, João Pessoa, 2012.