ESTUDANDO NUMERICAMENTE A DINÂMICA DE DEFEITOS TOPOLÓGICOS EM CRISTAIS LÍQUIDOS NEMÁTICOS

Leonardo Gabriel José Mendes Voltarelli (PIBIC/CNPq/FA/UEM), Hatsumi Mukai (Orientadora), e-mail: hmukai@uem.br, Breno Ferraz de Oliveira (Coorientador)
Universidade Estadual de Maringá/Centro de Ciências Exatas/Maringá, PR.

Ciências Exatas e da Terra - Física

Palavras-chave: cristais líquidos, 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. O cálculo numérico dessas equações foi realizado usando o programa LICRA (*Liquid Crystal Alghoritm*) (DE OLIVEIRA, 2012) e a partir de uma condição de inicial aleatória foi obtido uma simulação que apresenta defeitos topológicos. Usando a biblioteca FFTW (*Fastest Fourier Transform in the West*) calculou-se a correlação espacial do parâmetro de ordem nessas simulações e a partir dela foi possível obter o comprimento característico que ficou muito próximo do valor esperado (BRAY, 2002).

Introdução

Os cristais líquidos (CLs) são materiais que possuem uma fase cuja principal propriedade é fluir como um fluido isotrópico e, possuir ordenamento de suas moléculas semelhante a um cristal. Sendo assim, o CL possui ao mesmo tempo propriedades de líquido e de um cristal como o nome sugere. A fase isotrópica em um CL 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 para a fase nemática surgindo assim, os defeitos topológicos devido à quebra de simetria da fase isotrópica (KLEMAN, 2003). Defeitos do tipo linha possuem um comportamento similar aos defeitos tipo parede, para minimizar a energia eles diminuem seus comprimentos até o ponto de sumirem. Defeitos do tipo ponto possuem um mecanismo diferente, pares de defeitos com cargas topológicas opostas são aniquilados ao ocuparem o mesmo ponto, no entanto, esses defeitos sempre

aparecem aos pares, com cargas topológicas diferentes. Logo, preservam a carga total do sistema (princípio da conservação de cargas).

Tal processo governa a dinâmica dos defeitos, e é refletida na correlação espacial do parâmetro de ordem, a estrutura dos defeitos. A hipótese da escala afirma que, em um sentido estatístico, para tempos avançados deve existir apenas uma escala de comprimento característico $L(t)$ tal que a estrutura dos domínios é independente do tempo quando os comprimentos são escalados por essa função. Esse comprimento também pode ser entendido como a separação média entre os defeitos, ou seja, conforme o tempo passa os defeitos somem e o sistema em um instante inicial, caso escalado por $L(t)$, possui uma estrutura de defeitos que se parece com o sistema no instante t.

Materiais e métodos

O *LIquid CRystal Alghoritm* (DE OLIVEIRA, 2012) ou LICRA é um conjunto de códigos escritos em C, que permite a realização de simulações do parâmetro de ordem e do cálculo da equações que regem sua dinâmica, sendo ainda possível a introdução de um campo elétrico externo no sistema e da dinâmica devido a superfície. No entanto, o usamos para calcular apenas o *bulk* de uma rede com condições de contorno periódicas.
O método usado para resolver as equações da dinâmica de um cristal líquido foi o método de Runge-Kutta. Ele basicamente consiste em aproximar um intervalo de uma função por uma reta, sendo que sua precisão está fundamentalmente ligada ao tamanho do intervalo que se deseja calcular. Foram utilizados parâmetros do cristal líquido termotrópico MBBA (*4-methoxybenzylidene-4-butylanaline*). Na finalidade de obter a configuração com defeitos topológicos, textura *Schlieren*, foi usado uma condição inicial onde os diretores estavam orientados aleatoriamente representando a fase isotrópica. A partir de um tempo formaram-se os defeitos, que são os pontos onde se unem as manchas escuras, conforme indicado na Figura 1.

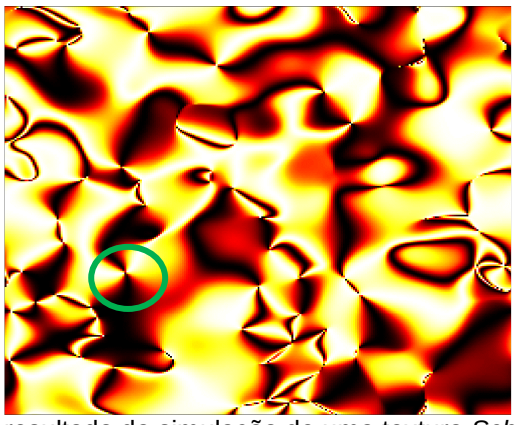

Figura 1 – Imagem do resultado da simulação de uma textura *Schlieren* usando o LICRA (*LIquid CRytal Alghoritm*). Circulado em verde um defeito topológico do tipo linha.

Este resultado foi apresentado em (VOLTARELLI, 2019) e reproduzido novamente. Para obter a forma do comprimento característico é necessária a função de correlação, no entanto, o cálculo numérico dela exige um grande poder de processamento tornando-o inviável. É mais eficiente calcular o parâmetro de ordem no espaço de Fourier e usando ele obter o fator de estruturas, uma vez com ele em posse basta fazer a transformada de Fourier inversa para obter a função de correlação.
Os cálculos numéricos das transformadas de Fourier foram feitos utilizando a biblioteca FFTW (*Fastest Fourier Transform in the West*). Esta biblioteca é constituída por um conjunto de códigos escritos em linguagem C que utilizam o algoritmo conhecido como transformada de Fourier rápida (Fast *Fourier Transform - FFT*).

Resultados e Discussão

A Figura 2 mostra o comportamento do comprimento característico ($L(t)$) obtido por meio das simulações.

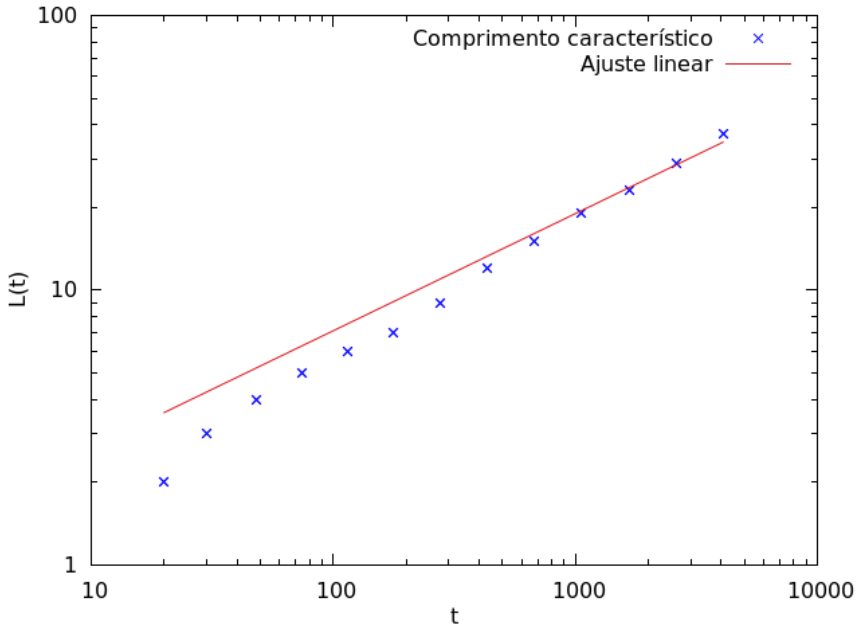

Figura 2 – Cada ponto representa a média de dez simulações do comprimento característico, sendo que, o ajuste para $L(t) = t^{\alpha}$ gerou um $\alpha = 0{,}486 \pm 0{,}005$.

.

Verificou-se que valor da potência do comprimento característico obtido pelas simulações tende ao esperado $(0{,}5)$ quando a diferença entre a temperatura da simulação e a temperatura a metaestabilidade tende a zero.

Conclusões

Por meio do cálculo numérico gerou-se, para parâmetros dos Cristais Líquidos Termotrópicos, os defeitos topológicos que são singularidades no parâmetro de ordem, podendo possuir cargas inteiras e semi-inteiras característica da textura *Schlieren*. A partir desse, foi obtida a correlação espacial do parâmetro de ordem e, a forma da evolução temporal do comprimento característico, $L(t) = t^{\alpha}$ forneceu $\alpha = 0{,}486 \pm 0{,}005$ que é próximo a $0{,}5$, o valor previsto.

Agradecimentos

À UEM pela bolsa e aos meus orientadores por ter proporcionado esse processo de aprendizagem direcionado à pesquisa científica.

Referências

BRAY, A. J., Theory of phase-ordering kinetics**, Journal Advances in Physics**, New York, v. 51, n. 2, p. 481–587, 2002.

DE OLIVEIRA, B. F. **Estudos numéricos da formação e dinâmica de defeitos topológicos em cristais líquidos nemáticos.** 2012. 126f. Tese (Doutorado), Programa de Pós-Graduação em Física**,** Universidade Federal da Paraíba, Centro de Ciências Exatas e da Natureza, Paraíba, 2012.

KLEMAN, M., LAVRENTOVICH, O. D., O. and FRIEDEL, J. **Soft Matter Physics:** An Introduction (Partially Ordered Systems), Springer, 2003.

VOLTARELLI, L. G. J. M., MUKAI, H. e DE OLIVEIRA, B. F**.** Estudo de Defeitos Topológicos em Sistema Líquido Cristalino, Resumo Expandido, **28º EAIC e 8º EAIC JR, Anais do Evento,** UEM, Maringá, 2019**.** Disponível em: www.eaic.uem.br/eaic2019/anais/artigos/3198.pdf. Acesso em: 17 jul. 2020.