

## ESTUDO DE PARÂMETROS ÓPTICOS POR MÉTODOS COMPUTACIONAIS

Nicolas Felipe Pinha Celestino (PIBIC/CNPq/FA/Uem), Newller Marcelo Kimura (Orientador), e-mail: newller@dfi.uem.br.

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

**Física- Ciências Exatas e da Terra- Física da Matéria Condensada.**

**Palavras-chave:** Birrefringência Óptica, Cristais Líquidos Termotrópicos, Cristais Líquidos Liotrópicos.

### Resumo

No presente trabalho estudamos parâmetros ópticos tais como a birrefringência e sinal óptico em cristais líquidos liotrópicos compostos pela mistura KL-K<sub>2</sub>SO<sub>4</sub>-DDeOH-H<sub>2</sub>O. Além disso, as primeiras análises foram feitas com o cristal líquido termotrópico K15 devido a sua estabilidade. O processo para obtenção desses parâmetros ópticos consiste em utilizar-se de texturas obtidas através do microscópio de luz polarizada, métodos computacionais e a técnica de espectrofotometria.

### Introdução

Os estudos dos estados da matéria sempre foram assunto de interesse para a comunidade científica, atualmente sabemos que há mais estados além dos três fundamentais observados no cotidiano (sólido, líquido e gasoso), como o plasma e o líquido cristalino. Os primeiros estudos do estado líquido cristalino ocorreram no final do século XIX pelo botânico austríaco Friedrich Reinitzer com o físico alemão Otto Lehmann. Reinitzer observou o que mais tarde foi classificado como cristal líquido termotrópico (CLT), há também outro tipo chamado cristal líquido liotrópico (CLL), esse segundo pode ser formado através da mistura de moléculas anfifílicas com um solvente como a água formando de aglomerados de moléculas da ordem de dezenas de nanômetros chamadas micelas. O formato e organização das micelas são determinados pela concentração micelar, dependendo da concentração podemos encontrar as fases nemáticas calamítica, discótica e biaxial, além de outras fases que não abordaremos no presente trabalho.

### Materiais e métodos

A amostra liotrópica utilizada ( $n_{12}$ ) foi preparada sob a concentração % de massa KL(0,70827), K<sub>2</sub>SO<sub>4</sub>(0,08117), DDeOH(0,16483) e H<sub>2</sub>O(1,31936), onde utilizamos para a pesagem das amostras uma balança METTLER TOLEDO modelo AT201 com precisão de 10<sup>-5</sup> g. Depois da pesagem, as amostras foram dopadas com 0,4µL de ferrofluido para otimizar

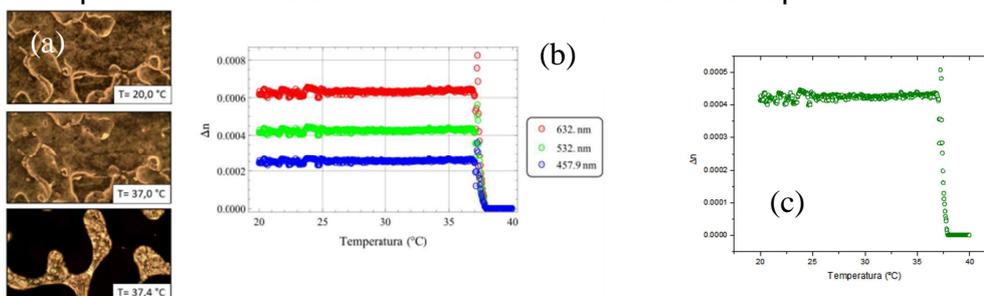
a orientação quando for necessária a aplicação das técnicas de caracterização da amostra.

Para a caracterização óptica foi utilizado um microscópio de luz polarizada com uma objetiva de 50x para as conoscopias e 5x para texturas, conectado ao microscópio há uma câmera para transmitir as imagens e um banho térmico para controlar a temperatura. As imagens captadas são processadas através de um software que converte a intensidade dos pixels de cada imagem em valores de 1 a 255 das cores RGB (*Red*, *Green* e *Blue*), em seguida, para cada imagem ele calcula o valor médio dessas cores [1]. Após processar todas as imagens é gerado uma planilha de dados, os dados foram plotados por meio do software Origin utilizando o desvio padrão em função da temperatura. A técnica de conosopia foi utilizada para a caracterização das fases nemáticas e como o foco do trabalho está em encontrar a birrefringência maiores detalhes podem ser encontrados em trabalhos da literatura [2].

## Resultados e Discussão

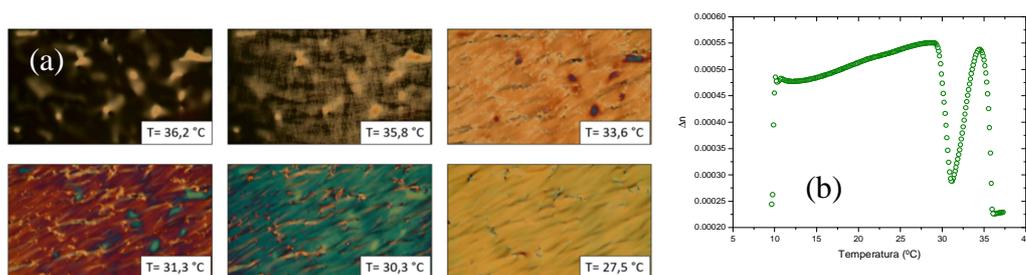
Primeiramente fizemos uma análise do cristal líquido termotrópico K15 (fase nemática), utilizamos deste composto devido a sua estabilidade quando se tratando das fases a serem analisadas. Existem duas formas de se obter a birrefringência a partir das texturas do cristal líquido, uma é aplicando um filtro monocromático na fonte de luz do microscópio e uma segunda é utilizando-se de um programa computacional capaz de decompor a imagem em 3 cores do espaço RGB (*Red*, *Green* e *Blue*), gerando assim 3 outras imagens. Para o cálculo da birrefringência utilizaremos a equação  $\Delta n = (\lambda/\pi d) \text{sen}^{-1}(I/I_0)^{1/2}$ , onde  $I$  é o valor médio das intensidades dos pixels de uma textura,  $I_0$  é a intensidade da fonte luminosa,  $\lambda$  é o comprimento de onda do filtro,  $d$  é a largura do porta amostras e  $\Delta n$  a birrefringência.

Neste primeiro composto utilizaremos ambas as formas citadas anteriormente de encontrar a birrefringência e, como podemos observar das figura 1 e 2, nota-se que em ambas as técnicas o resultado é equivalente, onde a birrefringência é quase nula em temperaturas acima de 37°, correspondente a fase isotrópica, e constante em temperaturas abaixo, característico da fase nemática, a variação abrupta da birrefringência ocorre entre essas duas fases. Focaremos nossos estudos no filtro monocromático verde pelo fato de ele ser o meio termo entre os três espectros.



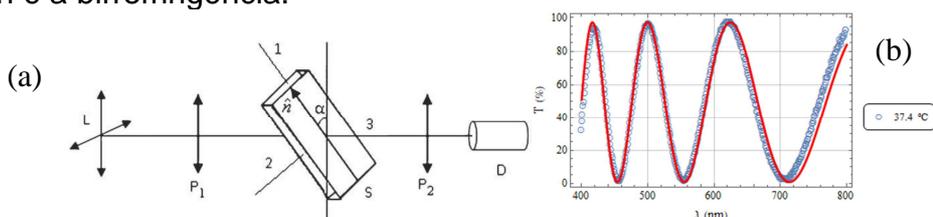
**Figura 1** - (a) Texturas da amostra K15 (b) birrefringência em função da temperatura dessas texturas (c) Birrefringência utilizando-se de um filtro monocromático verde ( $\lambda = 532$  nm).

Partindo para a amostra liotrópica, temos a amostra  $n_{12}$ , nesse cristal líquido fizemos uma varredura térmica com o uso de um filtro monocromático verde ( $\lambda = 532 \text{ nm}$ ), Analisando o gráfico decrescendo a temperatura observamos que, até  $35 \text{ }^\circ\text{C}$  a amostra tem uma birrefringência mínima (mesofase  $N_D$ ) embora seu valor não seja próximo de 0 pois, como podemos ver na Figura 2(a), a textura não estava totalmente orientada (aspecto escuro), após a transição temos um pico/vale entre as temperaturas  $35 \text{ }^\circ\text{C}$  e  $30 \text{ }^\circ\text{C}$  que corresponde a fase nemática biaxial já em temperaturas abaixo de  $30 \text{ }^\circ\text{C}$  observa-se um comportamento típico da birrefringência na fase  $N_C$ .



**Figura 2** – (a) texturas da amostra  $n_{12}$  em diferentes fases e temperaturas, (b) birrefringência com filtro verde ( $\lambda = 532 \text{ nm}$ ) da amostra  $n_{12}$  em função da temperatura.

Com relação à espectrofotometria a amostra é acomodada em uma cubeta, permanecendo na presença de capô magnético para manter uma orientação uniforme e ainda entre polarizadores paralelos Figura 3 (a), sendo as medidas realizadas em um espectrofotômetro UV-Vis (Cary 50). A figura 3 (b) mostra o fit utilizado nos dados experimentais obtidos para a temperatura de  $37,4 \text{ }^\circ\text{C}$  em que utilizamos a equação,  $I=I_0[1-\text{sen}^2(\delta/2)]$  com  $\delta=2\pi d(\Delta n)/\lambda$ , onde  $I$  é intensidade da luz transmitida,  $d$  é a espessura do porta amostra e  $\Delta n$  é a birrefringência.



**Figura 3** – (a) Aparato experimental [3]. Luz Incidente (L), Polarizadores (P1 e P2), Amostra (s) e detector (D), (b) Fit utilizado para o cálculo da birrefringência.

Repetindo o procedimento variando a temperatura obtivemos a birrefringência em função da temperatura para a amostra  $n_{12}$  ilustrada na figura 4. Podemos observar que acima de  $41^\circ\text{C}$  temos a fase nemática discótica, entre  $37$  e  $41^\circ\text{C}$  temos a fase nemática biaxial e abaixo de  $37 \text{ }^\circ\text{C}$  temos a fase nemática calamítica.

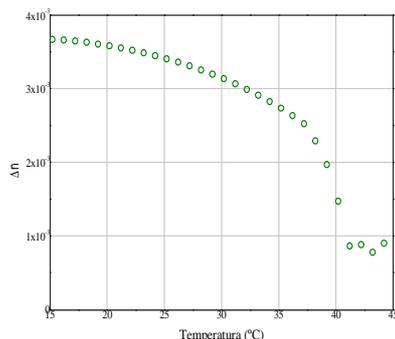


Figura 4 – Birrefringência versus temperatura para a amostra  $n_{12}$ .

## Conclusões

O presente projeto mostra o início de uma empreitada em direção a um dos objetivos primários, que é determinar uma maneira computacional de se obter a birrefringência de cristais líquidos liotrópicos e termotrópicos. Através do processamento das amostras K15 e  $n_{12}$  obtemos resultados que apresentam certa semelhança quando comparados com a literatura, embora ainda tenha o problema da ordem de grandeza.

Com relação à segunda metade deste projeto, realizamos medidas iniciais para a amostra  $n_{12}$  com o espectrofotômetro UV-VIS em encontramos a birrefringência em função da temperatura dentro da ordem de grandeza esperada.

## Agradecimentos

Agradecemos ao CNPq, a CAPES e à Fundação Araucária (PR) pelo suporte financeiro.

## Referências

- [1] SAMPAIO, A. R.; PALANGANA, A. J.; VISCOVINI, R. C. **Investigation of uniaxial and biaxial lyotropic nematic phase transitions by means of digital image processing.** *Mol. Cryst. Liq. Cryst.*, v. 408, ed. 1, p. 45-51, 2010.
- [2] BRAGA, W.S.; KIMURA, N.M.; LUDERS, D.D.; PALANGANA, A.J.; SAMPAIO, A.R.; SANTOS, A.R.; SIMÕES, M. **Conoscopic image of a biaxial negative nematic phase in a potassium laurate–decanol–D2O mixture,** *Journal of Molecular Liquids* 187 (2013) 20–23.
- [3] HIOKA, N.; KIMURA, N.M.; LUDERS, D.D.; OLIVEIRA, D.A.; PALANGANA, A.J.; SIMÕES, M. **Absorption coefficient and order parameter in a reentrant isotropic-calamitic nematic phase transition,** *Journal of Molecular Liquids* 166 (2012) 81–83.