



<https://eventos.utfpr.edu.br/sicite/sicite2017/index>

ANÁLISE DE DEFEITOS TOPOLÓGICOS EM UMA AMOSTRA DE CRISTAL LÍQUIDO NEMÁTICO

RESUMO

Gustavo Cousseau
cousseau@alunos.utfpr.edu.br
Universidade Tecnológica Federal
do Paraná, Pato Branco, Paraná,
Brasil

César Augusto Refosco Yednak
yednak@utfpr.edu.br
Universidade Tecnológica Federal
do Paraná, Pato Branco, Paraná,
Brasil

OBJETIVO: Neste trabalho, é proposta uma investigação da dinâmica dos defeitos topológicos em uma amostra de cristal líquido (CL) nemático, com condições de contorno periódicas, em outras palavras, com que velocidade esses defeitos se colapsam, mediante as posições iniciais desses defeitos ao longo da amostra, à medida que esta esfria com o passar do tempo. **MÉTODOS:** Será realizado um tratamento de dados obtidos de simulações computacionais, para uma amostra de CL nemático, utilizando uma discretização do modelo de Ginzburg-Landau, conhecida como modelo XY [1]. **RESULTADOS:** O colapso dos defeitos ocorre à medida que o tempo passa; em um determinado momento, eles tornam-se um ponto só. É possível observar que, pegando pares de defeitos com suas posições relativas diferentes, os deslocamentos desses pares não são iguais e, conseqüentemente, as velocidades relativas, também não são. **CONCLUSÕES:** A análise dos defeitos mostra que a cada instante de tempo eles se aproximam, ou seja, diminuindo o espaço entre eles e aumentando a velocidade de aproximação.

PALAVRAS-CHAVE: Amostra nemática. Defeitos topológicos. Colapso de defeitos.

INTRODUÇÃO

Em uma amostra nemática, o alinhamento molecular pode promover o aparecimento de "subdomínios" no meio nemático, que são regiões formadas por pontos ou linhas em que o parâmetro de ordem e , consequentemente, o vetor diretor (que dá a média da orientação molecular no meio) mudam descontinuamente; essas regiões são conhecidas como defeitos topológicos [2].

Esses defeitos possuem diferentes formas e podem ser induzidos de formas diferentes, como por exemplo: condições de temperatura específicas, efeitos de superfície, ação de um agente externo entre outras. Neste trabalho, é proposta uma investigação da dinâmica dos defeitos topológicos em uma célula nemática, com condições de contorno periódicas, em outras palavras, com que velocidade esses defeitos se colapsam, mediante as posições iniciais dos pares de defeitos ao longo da amostra, à medida que esta esfria com o passar do tempo. Na primeira parte deste trabalho, uma descrição sobre o modelo utilizado para obter os dados que foram tratados é apresentada. Na sequência, são discutidos os resultados obtidos para o deslocamento e velocidade relativa dos defeitos, através de uma análise numérica. A última parte do trabalho é dedicada às considerações finais.

METODOLOGIA

Para o estudo da dinâmica de defeitos topológicos, o modelo utilizado foi o modelo XY, que é uma discretização do Modelo Ginzburg-Landau (que descreve a evolução da ordem orientacional de um cristal líquido em termos de um tensor de segunda ordem simétrico e com traço nulo).

A evolução temporal do perfil do diretor em qualquer ponto de uma rede quadrada, considerando é claro, que cada i sítio dessa rede possa ser encarado como perfil do ângulo do diretor (ϕ_i), é dada pela equação [1]

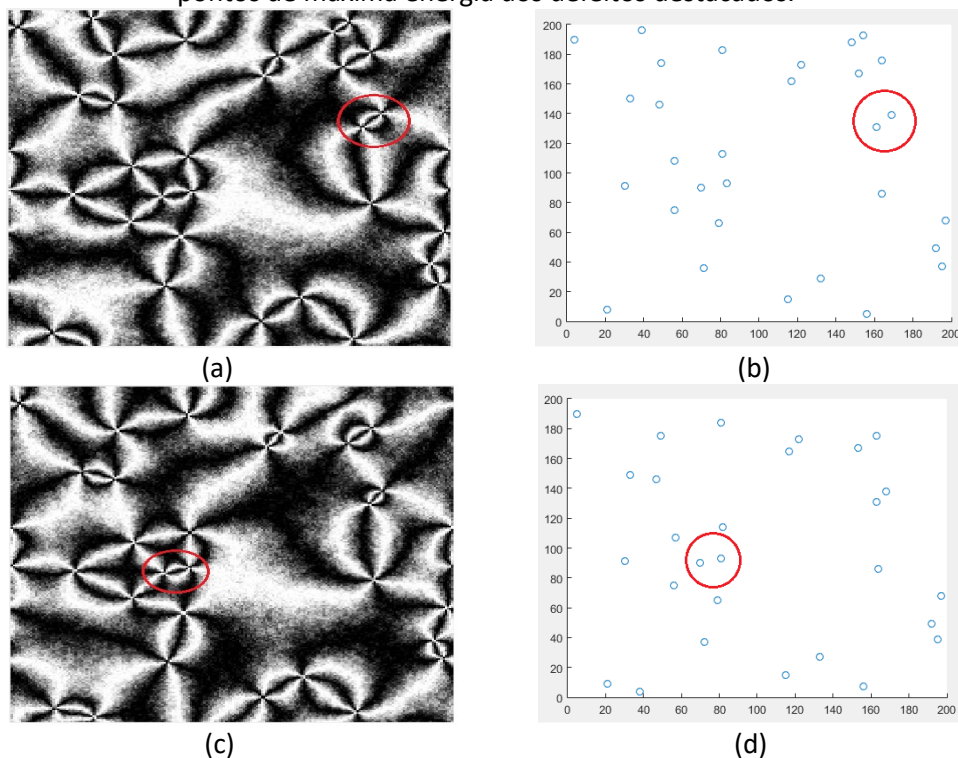
$$\phi_i(t + \Delta t) = \phi_i(t) - \Delta t \left\{ \eta_i(t) + \frac{\kappa}{\gamma} \sum_j \sin[\phi_i(t) - \phi_j(t)] \right\}, \quad (1)$$

onde η_i é o ruído de Langevin na rede i , Δt é a variação de tempo (adimensional), κ é uma constante elástica e γ é a constante de relaxação. A simulação foi realizada de forma que a soma em j foi executada sobre os oito primeiros vizinhos de i . Os defeitos podem ser facilmente identificados calculando a energia elástica máxima dada pela seguinte equação [1]:

$$\varepsilon_i = \sum_j [1 - \cos(\phi_i - \phi_j)]. \quad (2)$$

Um exemplo de como são os defeitos de uma amostra de CL pode ser visto na figura 1 (a) e figura 1 (c), onde formam uma textura, chamada textura *Schlieren*. Dois pares de defeitos específicos serão analisados nesse trabalho (em destaque na figura 1). Conforme a amostra esfria com o passar do tempo, esses defeitos se aproximam e se colapsam.

Figura 1. A figura (a) e (c) representam texturas de uma amostra de CL nemática e os defeitos que serão analisados em destaque. A figura (b) e (d) representam os pontos de máxima energia dos defeitos destacados.

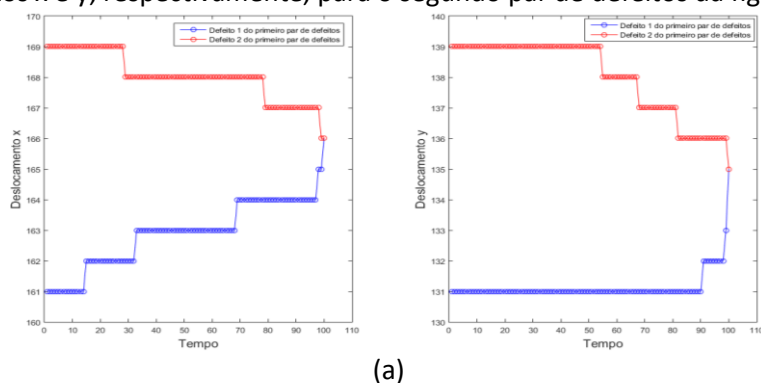


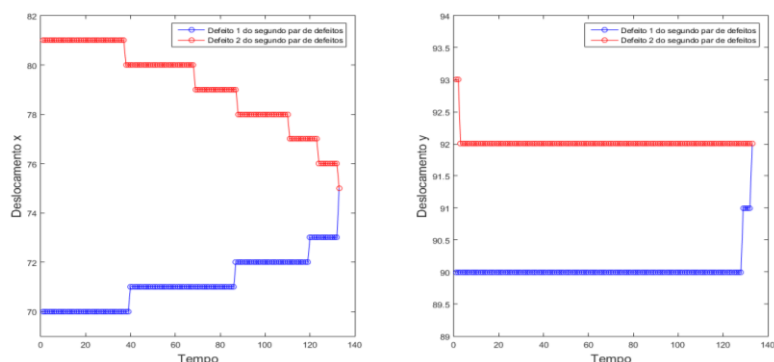
Através de um tratamento numérico de dados obtidos a partir da simulação acima mencionada, será possível encontrar os deslocamentos e as velocidades com que esses defeitos (destacados) se colapsam.

RESULTADOS

Conforme o tempo passa, os defeitos se encontram em um determinado momento, tornando-se um ponto só. Os deslocamentos podem ser vistos nas figuras abaixo:

Figura 2. A primeira e segunda figura de (a) representam os deslocamentos ao longo dos eixos x e y, respectivamente, para o primeiro par de defeitos da figura 1(a). A primeira e segunda figura de (b) representam os deslocamentos ao longo dos eixos x e y, respectivamente, para o segundo par de defeitos da figura 1(c).

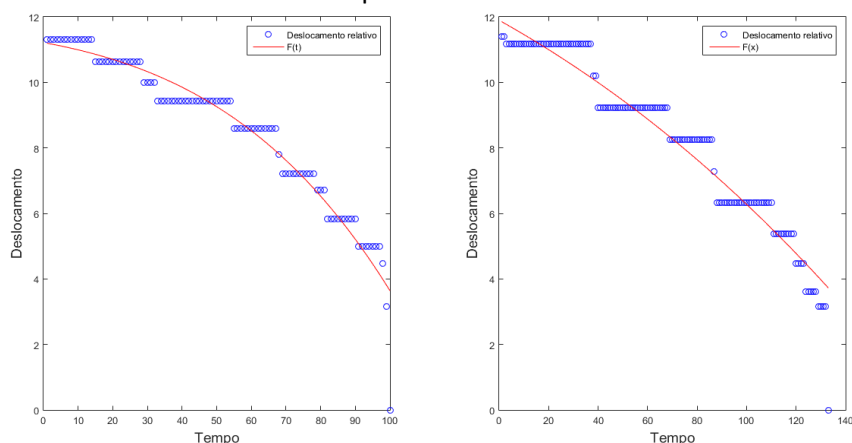




(b)

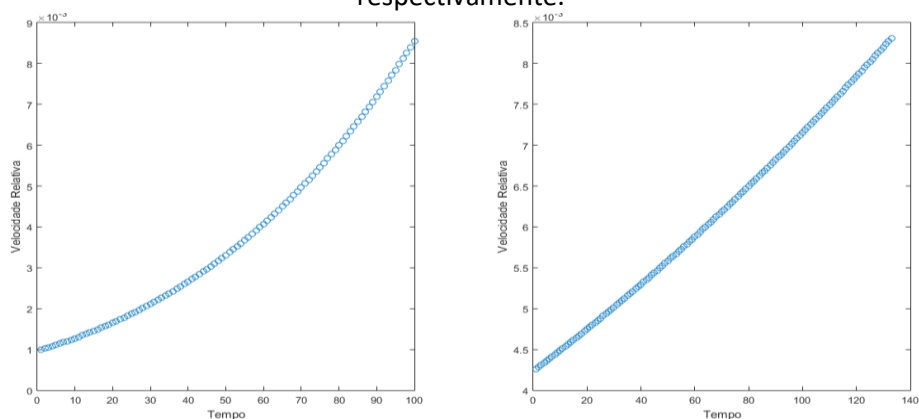
Observa-se que na figura 2(a), os defeitos se movem nos eixos x e y, no entanto, na figura 2(b), os defeitos se movem apenas no eixo x. Isso ocorre porque o eixo entre os defeitos está paralelo ao eixo x. Com esses dados, é possível obter o deslocamento relativo de cada par de defeitos, como mostra a figura 3.

Figura 3. Deslocamento relativo do primeiro e do segundo par de defeitos respectivamente.



Deriva-se o deslocamento relativo de cada par de defeitos para obter a velocidade relativa, que pode ser vista na figura 4:

Figura 4. Velocidade relativa do primeiro e do segundo par de defeitos respectivamente.



Nota-se que a velocidade cresce com o tempo, indicando que quanto mais os defeitos se aproximam, maior é a velocidade com que isso acontece. No primeiro gráfico da figura 4, a velocidade de colapso entre os defeitos cresceu com a lei de potência da ordem $x^{4,1}$, já no segundo gráfico, a velocidade cresceu na ordem $x^{2,3}$. Essa diferença pode ser explicada, porque esse primeiro gráfico da figura 4 está relacionado com o primeiro par de defeitos; mais isolado na amostra. Assim, a competição entre força elástica e viscosidade está limitada apenas a esse par, não sofrendo muito interferência dos defeitos mais distantes. Quanto ao segundo gráfico, essa situação não se repete, o que é comprovado observando a ordem de grandeza da velocidade de colapso (menor), uma vez que há uma maior interação entre o par de defeitos que colapsará e os defeitos ao seu redor.

CONSIDERAÇÕES FINAIS

Pelo fato dos defeitos topológicos serem considerados um problema na fabricação de mostradores de cristal líquido, o conhecimento sobre as principais condições de contorno que favoreçam seu colapso, não pode ser descartado. A análise dos defeitos mostra que a cada instante de tempo eles se aproximam, ou seja, diminuindo o espaço entre eles e aumentando a velocidade de aproximação. Para condições de contorno periódicas, o estudo revelou que o colapso desses defeitos ocorrerem mais rápido quando eles se encontram mais isolados na amostra. Isso ocorre porque a interação entre os defeitos (devida às forças de viscosidade e elástica) está limitada apenas ao par que colapsará.

Topological defects analysis in a nematic liquid crystal sample

ABSTRACT

OBJECTIVE: In this work, an investigation of the topological defect dynamics in a nematic liquid sample is proposed, with periodic boundary conditions, in other words, how fast these defects collapse, through the initial positions of these defects throughout the sample, when this one becomes cooler, as time passes. **METHODS:** A treatment of the data, obtained from computer simulations, will be performed, using a discretization of the Ginzburg-Landau Model, known as the XY Model [2]. **RESULTS:** The defects collapse occurs as time passes; in a moment, these defects become a single point. It is possible to observe that, by taking the defects pairs with different relative positions, the displacements of these pairs are not equal and, consequently, the relative velocities are not either. **CONCLUSIONS:** The analysis of the defects shows that they came near each other, decreasing the distance and increasing the velocity of approximation.

KEYWORDS: Nematic sample. Topological defects. Defects collapse.

AGRADECIMENTOS

Agradeço ao Professor César Augusto Refosco Yednak pela oportunidade e orientação no programa de iniciação científica.

REFERÊNCIAS

- [1] B. Yurke, A. N. Pargellis, T. Kovacs, e D. A. Huse. **COARSENING DYNAMICS OF THE XY MODEL**. Nova Jersey: Physical Review E, v. 47, n. 3, 20 out. 1992.
- [2] OLIVEIRA, Breno Ferraz de. **Estudos numéricos da formação e dinâmica de defeitos topológicos em cristais líquidos nemáticos**. 2012. 61 f. Tese (Doutorado) - Curso de Centro de Ciência Exatas e da Natureza, Departamento de Física, Universidade Federal da Paraíba, João Pessoa, 2012. Cap. 3.

Recebido: 31 ago. 2017.

Aprovado: 02 out. 2017.

Como citar:

COUSSEAU, G.; YEDNAK, C. A. R. Análise de defeitos topológicos em uma amostra de cristal líquido nemático. In: SEMINÁRIO DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA E TECNOLÓGICA DA UTFPR, 22., 2017, Londrina. **Anais eletrônicos...** Londrina: UTFPR, 2017. Disponível em: <<https://eventos.utfpr.edu.br/sicite/sicite2017/index>>. Acesso em: XXX.

Correspondência:

Gustavo Cousseau

Rua Gomerindo Palagi, número 160, Bairro Samburgaro, Pato Branco, Paraná, Brasil.

Direito autoral:

Este resumo expandido está licenciado sob os termos da Licença Creative Commons-Atribuição-Não Comercial 4.0 Internacional.

