

Simulação computacional de materiais líquido cristalino utilizando o modelo de Lebwohl-Lasher

Computer simulation of liquid crystal materials using the Lebwohl-Lasher model

RESUMO

Rubens Reino Serrone
rserrone@alunos.utfpr.edu.br
Universidade Tecnológica Federal do Paraná, Apucarana, Paraná, Brasil

Rodolfo Teixeira de Souza
rodolfosouza@utfpr.edu.br
Universidade Tecnológica Federal do Paraná, Apucarana, Paraná, Brasil

Este trabalho teve como objetivo reproduzir o estudo computacional de partículas líquido-cristalinas em uma rede cúbica tridimensional de tamanho variado, com o intuito de observar o comportamento da amostra submetida a diferentes temperaturas sem influência de campos externos. Para tal, foi utilizado o modelo de Lebwohl-Lasher que, assim como o modelo de Ising, usa o algoritmo de Metropolis para atualizar a rede e condições periódicas de fronteira. Os resultados observados mostraram o ponto de temperatura adimensional crítico bem definido, porém para pequenos tamanhos de sistema se observam curvas suaves e temperaturas de transição maiores, como esperado. Mostramos também que a temperatura crítica obtida neste trabalho varia da temperatura disponível da literatura em razão da taxa de aceitação de novos sistemas ter sido deixada livre

PALAVRAS-CHAVE: Cristais líquidos; Transição de fase; Modelo Lebwohl-Lasher;

ter terRecebido: 19 ago. 2019.

Aprovado: 01 out. 2019.

Direito autoral: Este trabalho está licenciado sob os termos da Licença Creative Commons-Atribuição 4.0 Internacional.



ABSTRACT

This work had as aim to reproduce the computer simulation analysis of liquid crystal molecules in a 3-D cubic system using varied sizes, with purpose to observe the system behavior submitted to changes of temperatures without external fields. For this study, it was used the Lebwohl-Lasher model which have a similar concept to Ising model using the Metropolis algorithm to update the lattice and periodic boundary condition. The results showed that the critical dimensionless temperature point is well defined, however for small size systems it was observed smooth curves and higher transition temperatures, as expected. Also, was shown that the critical temperature obtained here change from that from the literature due the new states acceptance rate was kept free.

KEYWORDS: Lebwohl-Lasher Model; Liquid Crystal; Phase Transition

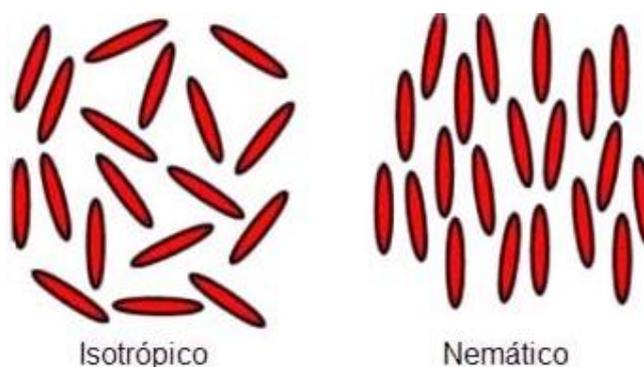
INTRODUÇÃO

São conhecidos, de maneira geral, três estados físicos da matéria: sólido, líquido e vapor. Sendo assim, conseguimos transitar por estes três estados alterando os parâmetros termodinâmicos de maneira que um sólido possa se tornar um líquido e um líquido possa se tornar vapor, ou vice-versa, com a alteração da temperatura e pressão. Além disso, é sabido que tais processos são reversíveis (OMORI,2018).

Porém, existem materiais que apresentam tanto as propriedades de um sólido cristalino, como as de um líquido isotrópico (FIGUEIREDO,2018). Tais materiais também são chamados de *mesomorfo* nos quais possuem mais de uma fase intermediária, ou *mesofase*, que é o caso do cristal líquido (MERLO,2000).

O cristal líquido possui uma ordem orientacional nas moléculas alongadas e desordem posicional de seus centros de massa, que permite a fluidez. Tais características são encontradas em materiais sólidos e líquidos, respectivamente. Consegue-se classificar os cristais líquidos por suas mesofases, como por exemplo a *nemática* apresentada neste trabalho, (figura 1). Conforme elevamos a temperatura, o material passa de uma fase nemática (orientada) para uma isotrópica (desorientada). Este fenômeno foi observado por Friedrich Reinitzer no século XIX. A fase isotrópica não possui ordenamento, já a nemática possui uma orientação média, definido pelo diretor \vec{n} . Além disso, uma forte característica do material líquido cristalino é a birrefringência ótica, que indica a existência de mais de um índice de refração, ou seja, possuindo tal propriedade ótica é possível obter diferentes cores com a incidência de uma luz polarizada (FIGUEIREDO,2018).

Figura 1:Fases isotrópica e nemática



Fonte: Internet, 2019.

De maneira geral o cristal líquido é investigado com interesse tecnológico, devido à suas propriedades óticas e sua capacidade de responder estímulos quando submetido a forças externas (OMORI,2018). Na tecnologia o tipo de

cristal líquido mais utilizado são os termotrópicos e é aplicado em mostradores de informação (*displays*) (ELY,2006).

Sendo um material de cunho tecnológico, pesquisas podem ser feitas para melhorar suas aplicações na sociedade. Sabido disso, o modelo de Lebwohl-Lasher apresentado neste trabalho simula com eficiência os experimentos que são realizados em laboratório.

MODELO DE LEBWOHL-LASHER

O modelo que torna possível o experimento computacional apresenta conceito semelhante ao modelo de Ising computacional, porém, com algumas modificações cruciais. Em julho de 1972 Lebwohl e Lasher publicaram o primeiro trabalho de simulações da área de cristais líquidos a fim de chegarem ao mesmo resultado que Maier e Saupe encontrados pelo método do campo médio (LEBWOHL;LASHER, 1972): uma transição de uma fase de primeira ordem, ou seja, descontínua.

A simulação consiste nas seguintes etapas:

- Primeiramente se define um sistema, normalmente se adota um sistema cúbico pela praticidade da geometria, mas dependendo da natureza do problema pode-se ajustar o sistema para outros tipos de topologia (DE SOUZA ,2012). É importante ressaltar as condições periódicas de fronteira, para que a amostra que está sendo analisada seja uma pequena parte de uma rede infinita, reduzindo os efeitos de tamanho finito.
- É adotada uma orientação ordenada ou desordenada das moléculas do sistema. A escolha da orientação depende da temperatura adimensional (TA) inicial do sistema. Por questões de praticidade pode-se definir uma rede ordenada para temperaturas iniciais abaixo da temperatura crítica, e desordenadas para temperaturas acima da temperatura crítica (OMORI,2018).
- É aplicado o algoritmo de Metropolis para atualizar a rede: escolhe-se um ponto da rede aleatoriamente e computa-se a sua energia E_i . Sorteia-se uma nova configuração aleatória (sem qualquer critério adicional) para essa molécula e computa-se a energia E_f desse novo estado. O novo estado é aceito com probabilidade

$$p = e^{(E_i - E_f)/T * k_B} \quad (1)$$

Onde k_B é a constante de Boltzman. Quando fizermos N^3 tentativas de mover as moléculas, considera-se um passo de Monte Carlo.

- Antes de coletar os dados, deve-se aguardar a estabilização do sistema, tal procedimento também é chamado de tempo de relaxamento ou transiente.
- A evolução do sistema é de forma semelhante à do modelo de Ising, realizando muitos sorteios com o algoritmo de Metropolis.

- Após o tempo de relaxamento inicia-se o processo de coleta de dados do sistema e calcula-se a média e variância das variáveis desejadas.

METODOLOGIA

O código foi desenvolvido em linguagem C no aplicativo CodeBlocks e os gráficos gerados no programa GnuPlot, ambos *opensource*. Para o cálculo do parâmetro de ordem foi necessário instalar a biblioteca científica *GSL GNU Library* para facilitar o cálculo do autovalor da matriz gerada. Foi estabelecido um sistema cúbico de moléculas orientadas de tamanhos $L= 5,10,12,15$ e 20 submetidos a uma temperatura inicial igual a 0.1 , variando em uma diferença de temperatura igual a $0,1$. Para cada temperatura, o sistema foi então submetido a 10000 passos de Monte Carlo, dos quais 5000 foram rejeitados a fim de estabilizar a rede. A partir disso a energia média e a variância da energia média do sistema foram adquiridas pelo potencial de Lebwohl-Lasher. (2).

$$E = - \sum_{ij} J_{\{ij\}} P_2(\cos\theta_{ij}) \quad (2)$$

Onde J representa a intensidade de interação, P_2 o segundo polinômio de Legendre e θ_{ij} o ângulo entre os eixos das moléculas escolhidas em pares.

Para o cálculo do parâmetro de ordem (PO), dado que é crucial para observar a transição de fase, é retirado do maior autovalor da matriz. (3).

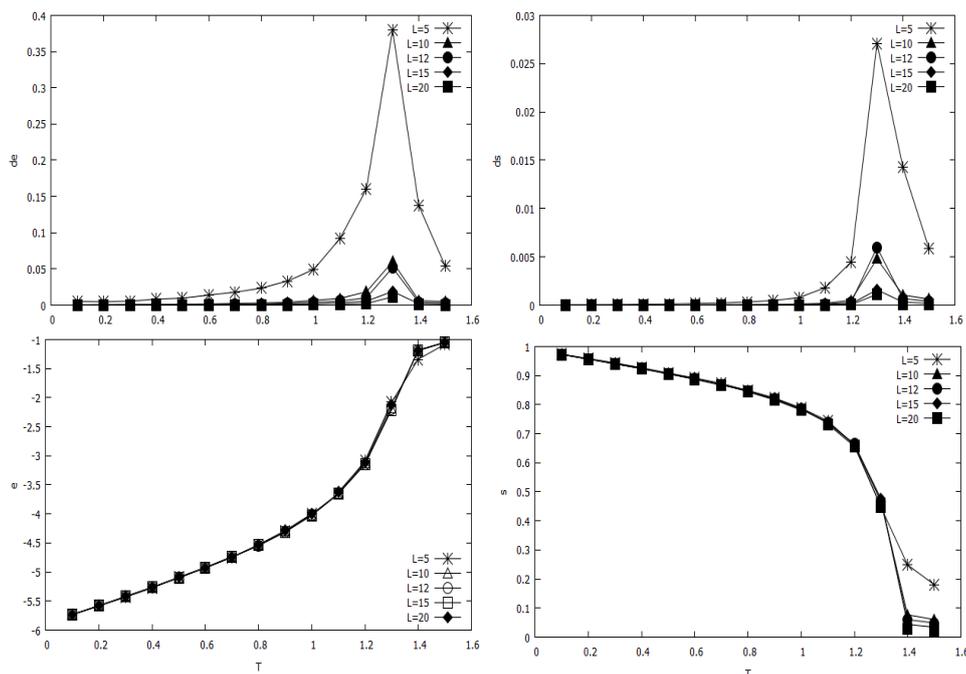
$$Q = \frac{1}{N} \sum_{k=0}^N u_{ki} u_{kj} - \frac{1}{3} \delta_{ij} \quad (3)$$

De forma que δ_{ij} é delta de Kronecker, ou seja, igual a 1 se i for igual a j , e zero se i diferente de j . Assim, são retirados os parâmetros de ordem médio, energia média, e suas variâncias.

RESULTADOS E DISCUSSÕES

Para a amostra de tamanho $L=10$, o tempo de conclusão do código foi de $6,57$ horas em um processador I3 4005. Ao dobrarmos o tamanho da rede, o tempo de conclusão aumenta em um fator de 8 .

Figura 2: Da esquerda para direita: A) Variância da energia versus TA. B) Variância do PO versus TA. C) Energia média versus TA. D) PO Médio versus TA



Fonte: Autoria própria

Conforme observado na figura 2-D), fica evidente a existência de um ponto crítico que representa a queda brusca entre os valores de temperaturas adimensionais $T=1,2$ e $T=1,3$. Estudos computacionais mostram que o valor crítico é de 1,1232 (DE SOUZA,2012). Consegue-se observar que conforme o tamanho do sistema aumenta, fica claro a transição de fase de primeira ordem do sistema, devido a descontinuidade presente no gráfico para sistemas maiores, por exemplo da rede de tamanho $L=20$. Já para amostras menores tal fenômeno não é observado. Nas figuras 2-A e 2-B é possível visualizar o pico de variância que é dado no ponto crítico das variáveis PO e energia média para a amostra $L=5$. Na figura 2-C é visível a mudança de energia média de -6 (ordenado) e tende a zero a medida que T aumenta (desordenado) indicando uma mudança de fase nemática -isotrópica.

Essa variação significativa na temperatura crítica se deve ao fato de que não desenvolvemos no código um mecanismo para controlar a taxa em que novos estados são aceitos via algoritmo de metrópolis. De fato, um dos nossos objetivos era investigar os efeitos térmicos dessa ausência. Para que o sistema siga estatisticamente correto, a taxa deve se manter próximo de 0,5 em sistemas contínuos como esse que estamos lidando. Esse controle pode ser feito restringindo a orientação de um novo vetor dentro de um cone centrado na orientação atual da molécula com abertura máxima de um ângulo que é ajustado para manter essa taxa. Vemos, por tanto, que essa regra é fundamental para que o sistema apresente o comportamento físico esperado.

CONCLUSÕES

REFERÊNCIAS

TÓPICOS avançados em física - aula 01 - cristais líquidos. Produção de Univesp. Realizado por Antônio Martins Figueiredo Neto. São Paulo: Univesp, 2018. Color. Disponível em: <<https://www.youtube.com/watch?v=eXvffhDzJyE&t=624s>>. Acesso em: 14 ago. 2019.

DE SOUZA, Rodolfo Teixeira. Efeitos de Superfície em Nemáticos Confinados: Simulação Computacional e Teoria Elástica.

OMORI, Koudhi Eric. Análise Computacional de Cristais Líquidos sob Ancoramento Periódico. *PL*

MERLO, Aloir Antonio; GALLARDO, Hugo Alejandro Olmedo; TAYLOR, Ted Ray. Cristais líquidos ferroelétricos CLF: uma abordagem sintética. *Química nova*. São Paulo. Vol. 24, n. 3 (2001), p. 362, 2001.

ELY, Fernando; HAMANAKA, M. H. M. O.; MAMMANA, Alaide Pellegrini. Cristais líquidos colesterais: a quiralidade revela as suas cores. *Química Nova*, v. 30, n. 7, p. 1776, 2007.

LEBWOHL, Paul A.; LASHER, Gordon. Nematic-liquid-crystal order—a Monte Carlo calculation. *Physical Review A*, v. 6, n. 1, p. 426, 1972.

AGRADECIMENTOS

Agradecemos ao CNPq pelo suporte financeiro e incentivo à pesquisa nacional brasileira.