

Resposta elétrica em uma célula Nemática através do Modelo XY

Electrical response in a Nematic cell through the XY Model

RESUMO

O comportamento do perfil do ângulo diretor em uma amostra de cristal líquido nemático confinado entre duas superfícies paralelas e, submetido a um campo elétrico externo foi investigado através do Modelo XY. Por conseguinte, foi possível determinar o campo elétrico necessário para induzir uma reorientação molecular, ou seja, a transição de Fréedericksz, e também o equacionamento necessário para obter a capacitância e a resistência elétrica em função do ângulo diretor. De posse desses resultados, foi investigada a influência de alguns parâmetros distintos, como a variação da espessura e da temperatura da amostra na resposta elétrica, e assim, apresentando o comportamento decorrente dessa influência.

PALAVRAS-CHAVE: Resposta elétrica. Reorientação Molecular. Perfil do Diretor.

ABSTRACT

The director profile angle behavior in a sample of nematic liquid crystal confined between two parallel surfaces and subjected to an external electric field was investigated using the XY Model. Therefore, it was possible to determine the electric field threshold necessary to induce a molecular reorientation, in other words, the Fréedericksz transition, and also the equations necessary to obtain the capacitance and electrical resistance as a function of the director angle. With these results, the influence of some distinct parameters was investigated, such as a variation in the thickness and temperature of the sample in the electrical response, and thus, presenting the behavior arising from this influence.

KEYWORDS: Electrical response. Molecular reorientation. Director profile.

Matheus Bez da Silveira
matheus_cvv@hotmail.com
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

Recebido: 19 ago. 2020.

Aprovado: 01 out. 2020.

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



INTRODUÇÃO

Os cristais líquidos nemáticos (CLNs) podem ser definidos como uma mesofase dos cristais líquidos, na qual a orientação molecular pode ser descrita por um vetor diretor n (de GENNES, 1993, p.35). Neste material, percebe-se que as moléculas tanto apresentam uma ordem orientacional preferencial, como também, podem ser facilmente reorientadas na presença de um campo elétrico externo, refletindo em uma variação na anisotropia dielétrica dos CLNs, acarretando em modificações nas suas propriedades óticas e elétricas (de GENNES, 1993, p.36).

Vsevolod Fréedericksz em 1933, constatou que uma amostra de cristal líquido uniformemente orientada pode ser distorcida através da aplicação de um campo elétrico ou magnético. Este fenômeno é uma transição de fase de segunda ordem, que possibilita estimar o valor de campo elétrico necessário para induzir uma reorientação molecular, denominado campo elétrico crítico (E_c).

Decorre dos estudos acerca dos cristais líquidos que quando o campo elétrico aplicado é menor que o E_c , as propriedades dielétricas do material se assemelham aos meios eletricamente isotrópicos (ATASEI, R. *et al*, 2008, p.6116), no entanto, ao aplicar campos elétricos de maior magnitude, as propriedades tendem se modificar acompanhando a variação do perfil do ângulo diretor.

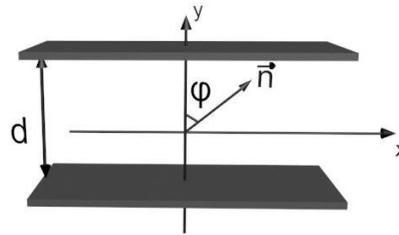
Desta forma, o objetivo é determinar o comportamento das propriedades elétricas de resistência e capacitância, em uma amostra de CLN durante essa transição de fase. Em virtude destas propriedades dependerem de fatores externos e de características geométricas, aprofundou-se o estudo para determinar a resposta elétrica quando há variações de temperatura e espessura da amostra.

A fim de realizar os cálculos de resistência e capacitância, foi necessário determinar previamente a variação do perfil do diretor em relação ao campo elétrico aplicado. Foi então utilizada uma amostra de CLN confinada entre duas placas paralelas, sujeita apenas a deformações planares do tipo *splay* (divergência) e *bend* (flexão). Também, foi necessário desenvolver uma modelagem computacional utilizando o Modelo XY, que representa uma discretização do Modelo Ginzburg-Landau (YURKE, B.; PARGELLIS, A. N.; KOVACS, T.; HUSE, D. A., 1993, p.1526).

METODOLOGIA

Para o estudo da resposta elétrica em um meio nemático utilizando o modelo XY, deve-se considerar as seguintes propriedades para a representação da célula de cristal líquido: Espessura (d), comprimento longo na direção x e estar sujeita apenas a deformações planares.

Figura 1 – Representação esquemática de uma amostra de cristal líquido nemático.



Autor: Autoria própria (2019).

As moléculas na amostra de cristal líquido apresentam uma ordem orientacional que depende tanto de condições de ancoramento impostas pelas superfícies da célula, quanto da intensidade de campos magnéticos ou elétricos aplicados. Neste caso, a representação da orientação é dada pelo vetor diretor \vec{n} , o qual pode ser escrito na seguinte forma.

$$\vec{n} = \text{sen } \varphi(y) \hat{i} + \text{cos } \varphi(y) \hat{j} \quad (1)$$

Para iniciar o estudo sobre a influência da reorientação molecular na resposta elétrica, será preciso determinar como o perfil do diretor é afetado pelo campo elétrico externo. No presente trabalho, esse perfil será obtido mediante à transição de Fréedericksz (DA SILVEIRA, M. B.; YEDNAK, C. A. R., 2019, p.2), utilizando o modelo XY.

Através do modelo XY (PARGELLIS, A. N. FINN, P.; GOODBY, J. W.; PANIZZA, P.; YURKE, B.; CLADIS, P. E., 1992, p.7766), foi possível determinar o campo elétrico crítico (E_c), ou seja, o valor do campo no qual ocorre a distorção na amostra. Também foram adotadas duas condições de contorno: a primeira consiste em utilizar uma amostra uniformemente orientada perpendicularmente às superfícies da célula, e, a segunda é considerar a condição de ancoramento forte, ou seja, independentemente do campo magnético ou elétrico aplicado, a orientação molecular na superfície permanece inalterada.

A fim de realizar a simulação de um cristal líquido submetido à uma diferença de potencial, foi adotada uma rede quadrada onde para cada sítio i , há uma representação do perfil do ângulo do diretor (φ_i) (YURKE, B.; PARGELLIS, A. N.; KOVACS, T.; HUSE, D. A., 1993, p.1526). Desta forma, pode-se expressar a variação temporal do comportamento de (φ_i) através da seguinte equação diferencial ordinária:

$$\gamma \frac{d\varphi_i}{dt} = -K \sum_j \text{sen}(\varphi_i - \varphi_j) - \eta_i, \quad (2)$$

em que, η_i corresponde ao ruído de Langevin no i sítio, e, γ representa a constante de relaxação. O primeiro termo após a igualdade está associado a densidade de energia elástica de Frank, com K sendo a aproximação para uma única constante elástica. O ruído de Langevin (η_i), é expresso pela seguinte equação:

$$\eta_i = 2\pi C_l r_i, \quad (3)$$

em que C_l representa um fator intensificador associado a temperatura cuja a amostra está submetida, e r_i é uma matriz aleatória com valores variando de -0.5 até 0.5 que representa a limitação da orientação do diretor.

Resolvendo a equação diferencial ordinária, obtêm-se uma representação da variação temporal do comportamento de (φ_i) na presença de um campo elétrico, da seguinte forma:

$$\varphi_i(t + \Delta t) = \varphi_i(t) - \Delta t \left\{ \eta_i(t) + \frac{k}{\gamma} \sum_j \text{sen}[\varphi_i(t) - \varphi_j(t)] + \epsilon_a E^2 \cos^2[\varphi_i(t)] \right\}, \quad (4)$$

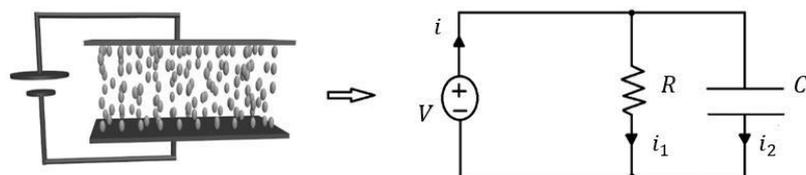
em que Δt representa a variação de tempo, o último termo dentro das chaves representa a contribuição do campo elétrico, isoladamente ϵ_a é a anisotropia dielétrica ($\epsilon_a = \epsilon_{\parallel} - \epsilon_{\perp}$, onde \parallel e \perp são referentes a orientação de \mathbf{n}) a qual para o este caso foi considerada negativa, e, E corresponde a magnitude do campo elétrico aplicado.

Nesta simulação a soma em j foi realizada ao longo dos oito vizinhos mais próximos de i , logo, quanto maior for a espessura (d) entre as superfícies onde está contido o cristal líquido, maior será a quantidade de somas efetuadas, e, portanto, maior será a interação. Desta maneira, para a realização dos cálculos utilizou-se as seguintes variáveis reduzidas em função de (d): $\phi' = \phi / d$, $E' = E / d$, $C'_l = C_l / d$, $R' = R / d$, $C' = C / d$, e portanto, as grandezas demonstradas nos gráficos serão adimensionais.

Em uma amostra nemática, ao aplicar um campo elétrico externo paralelo ao eixo y , como demonstrado na Fig.1, e, considerando $\epsilon_a < 0$, haverá duas situações distintas: quando $E' < Ec$, a amostra encontra-se uniformemente orientada, já quando $E' > Ec$, a amostra está distorcida, o que descreve a transição de Fréedericksz (DA SILVEIRA, M. B.; YEDNAK, C. A. R., 2019, p.2). Essa reorientação molecular do diretor afeta a resposta elétrica, afinal, é possível escrever as expressões para as propriedades elétricas em termos do perfil do diretor \mathbf{n} . Uma vez que o cristal líquido pode ser considerado como um dielétrico dentro de um capacitor de placas paralelas, quando ocorre variações no perfil do diretor, ocorre também uma variação do comportamento dielétrico, que por sua vez, afeta a resposta elétrica da amostra de CLN.

A Fig.2 ilustra como seria um diagrama esquemático de um circuito, considerando um paralelo entre resistência (R') e capacitância (C'), sujeita a uma diferença de potencial $V(t)$.

Figura 2 – Representação esquemática do cristal líquido em um sistema RC.



Autor: Autoria própria (2020).

Os eixos cartesianos de referência têm o eixo y como perpendicular às superfícies limitantes localizadas em $y = \pm d/2$. Como este problema aborda apenas deformações planares do tipo *splay-bend*, então $\varphi_i(y)$ representa o ângulo formado entre o diretor e o eixo y . A partir destas informações, pode-se definir a seguir as equações para a resistência equivalente e capacitância equivalente (ATASEI, R. et al, 2008, p.6117).

$$R = \frac{1}{A} \int_{-\frac{d}{2}}^{\frac{d}{2}} \frac{dy}{\sigma_{yy}}, \quad C^{-1} = \frac{1}{A} \int_{-\frac{d}{2}}^{\frac{d}{2}} \frac{dy}{\epsilon_{yy}}, \quad (5)$$

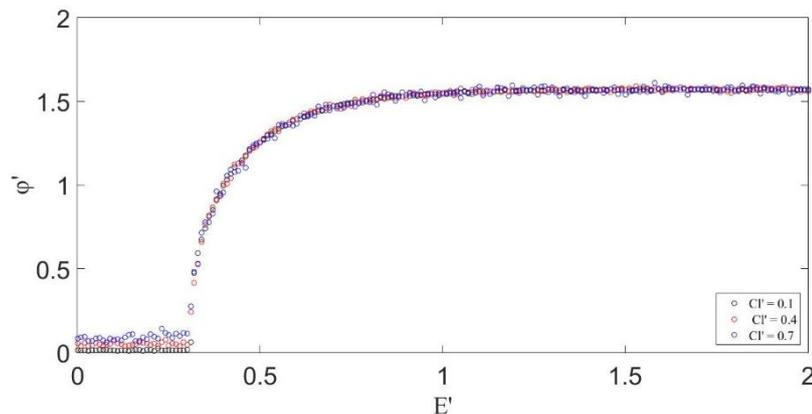
na Eq.5, os termos σ_{yy} e ϵ_{yy} correspondem as componentes yy dos tensores de condutividade e dielétrico respectivamente, em que $\sigma_{yy} = \sigma_{\perp} + \sigma_a \text{sen}^2 \psi(y)$ e $\epsilon_{yy} = \epsilon_{\perp} + \epsilon_a \text{sen}^2 \psi(y)$, e A é a área da superfície. Os termos σ_a e ϵ_a representam os tensores de condutividade elétrica e a anisotropia dielétrica respectivamente, em que $\sigma_a = \sigma_{\parallel} - \sigma_{\perp}$ e $\epsilon_a = \epsilon_{\parallel} - \epsilon_{\perp}$. Já as notações \parallel e \perp referem-se a orientação do diretor com o eixo y .

RESULTADOS E DISCUSSÕES

Para demonstrar o comportamento da resposta elétrica em uma amostra de cristal líquido nemática, foi necessário utilizar valores característicos para determinados parâmetros: $\epsilon_o = 8,854187 \times 10^{-12} \text{ F/m}$, $\epsilon_{\parallel} = 20.6 \epsilon_o$, $\epsilon_{\perp} = 5.5 \epsilon_o$, $\sigma_{\parallel} = 10^{-10} (\Omega m)^{-1}$, $\sigma_{\perp} = 5 \sigma_{\parallel}$ e $A = 10^{-4} \text{ m}^2$ (ATASEI, R. *et al*, 2008, p.6118). A fim de tornar a análise mais abrangente, a amostra foi submetida a variações de temperatura (C') e de distância entre as superfícies confinadoras (d).

A base para a realização do estudo da resposta elétrica, é entender como se dá o comportamento do perfil do ângulo diretor (φ), obtido através do estudo da Transição de Fréedericksz.

Figura 3 – Representação do perfil do diretor antes e depois da Transição de Fréedericksz para $d = 19$, $C'_1 = 0,1$, $C'_1 = 0,4$ e $C'_1 = 0,7$.



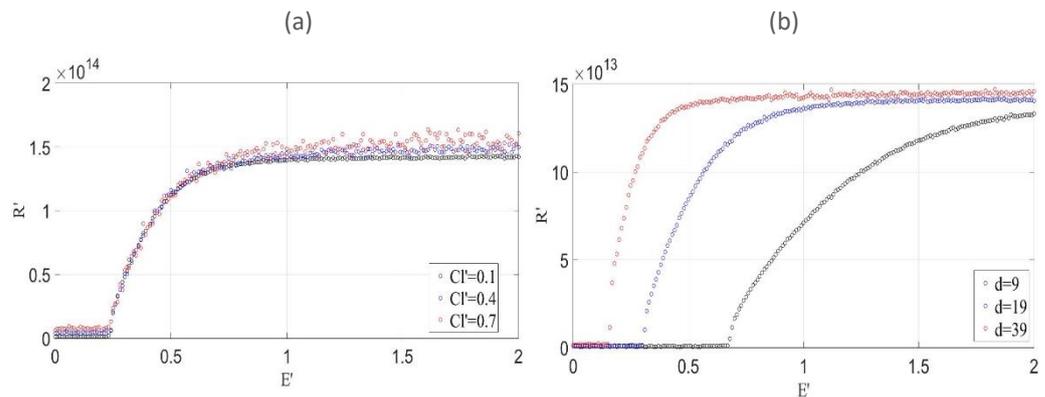
Fonte: Autoria própria (2020).

No gráfico acima, percebe-se uma acentuada elevação (momento em que ocorre a transição de Fréedericksz), sendo essa, associada à orientação molecular no interior da amostra. É possível observar que, para um valor de campo elétrico $E' < E_c$ e uma pequena contribuição de energia térmica, o diretor é representado por $\varphi' = 0$ e, portanto, as moléculas permanecem perpendiculares às superfícies da amostra. No entanto, também é perceptível que o aumento da energia térmica no sistema acarreta variações para o grau do perfil do diretor, implicando que nestes casos não é mais possível afirmar que a amostra está uniformemente orientada mesmo para valores de $E' < E_c$. Já para os valores de campo, $E' > E_c$, temos $0 < \varphi' \leq \pi/2$, representando que houve uma reorientação molecular, de modo que ao passar do tempo, com incrementos no valor de E' , há uma tendência de

que as moléculas no meio da amostra se tornem paralelas às superfícies confinadoras.

A seguir serão exibidos os resultados obtidos a partir do estudo da resistência elétrica (R').

Figura 4 – A figura (a) representa a resistência elétrica (R') para $d = 24$ e, $C_l' = 0,1$, $C_l' = 0,4$, $C_l' = 0,7$, a figura (b) representa a resistência elétrica (R') para $C_l' = 0,1$ e $d = 9$, $d = 19$, $d = 39$.



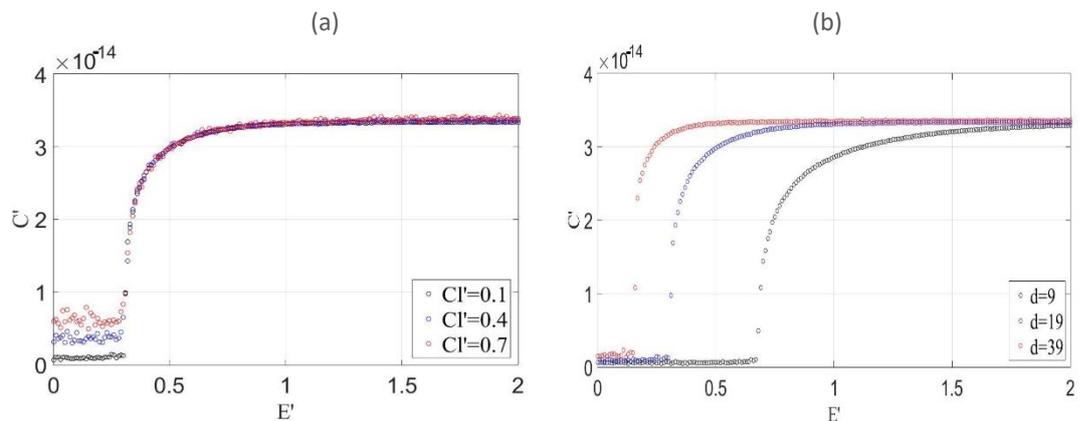
Fonte: Autoria própria (2020).

Na Fig.4(a), percebe-se que conforme há um acréscimo de temperatura, surgem duas características marcantes: a primeira refere-se ao aumento do valor da resistência para um mesmo valor de E' , e a segunda representa uma desordem na uniformidade do gráfico. Note que nos valores de resistência para $Cl' = 0.1$, a curva tem um comportamento mais uniforme do que para os valores referentes ao $Cl' = 0.7$. Já a Fig.4(b) possibilita extrair algumas características relevantes para compreender como ocorre a interação entre as superfícies da amostra, campo elétrico e resistência. A princípio percebe-se que para a mesma temperatura, o aumento da resistência tende a ser suave, sem muitas oscilações ao longo da curva, implicando que as turbulências observadas na Fig.5(a) são de fato oriundas do aumento da temperatura. Percebe-se também que quanto maior é a distância entre as superfícies, maior será o valor da resistência para o mesmo valor de campo.

Na sequência serão discutidos os resultados obtidos mediante o estudo do comportamento da capacitância (C') na amostra nemática.

Na Fig.5(a) através da análise do comportamento temporal da capacitância, percebe-se que a atuação efetiva da variação de temperatura ocorre apenas no trecho anterior a transição, afinal, quanto maior a energia térmica fornecida ao sistema maior se torna o grau de desordem molecular, e conseqüentemente, a amostra tende a perder sua orientação inicial. Nota-se que para valores de campo elétrico $E' < Ec$, quanto maior o valor da temperatura, maior é o valor da capacitância. No entanto, após a transição, momento em que as moléculas já estão reorientadas, percebe-se que o aumento tanto da temperatura, quanto do campo elétrico pouco varia os valores de capacitância, implicando que foi atingido o máximo de armazenamento de energia.

Figura 5 – A figura (a) representa a Capacitância (C') para $d = 19$ e, $C_l' = 0,1$, $C_l' = 0,4$, $C_l' = 0,7$, a figura (b) representa a Capacitância (C') para $C_l' = 0,1$ e $d = 9$, $d = 19$, $d = 39$.



Fonte: Autoria própria (2020).

A partir da análise da Fig.5(b) é possível concluir que a transição no gráfico da capacitância ocorre em um período de tempo mais curto à medida que a espessura da amostra aumenta, este fato deve-se a interferência exercida pela energia elástica (proveniente das características de ancoramento) no sistema. De maneira geral, quanto mais próximas estão as superfícies, mais efetiva é a energia de ancoramento sobre o meio da amostra, demandando um campo elétrico crítico (E_c) maior para reorientar as moléculas e induzir a transição.

CONCLUSÕES

As simulações computacionais realizadas através do modelo XY possibilitaram desenvolver um estudo a respeito da resposta elétrica em uma amostra de CLN. Dessa maneira, foi possível determinar a resposta elétrica para uma amostra nemática e, posteriormente, os efeitos gerados nas propriedades do dielétrico em virtude de mudanças de temperatura e espessura da amostra.

O fato de o CLN não apresentar o comportamento de um dielétrico comum, decorre de que suas propriedades dielétricas variam em conjunto com a reorientação do perfil do diretor. Embora o cristal líquido seja um material anisotrópico, quando submetido a uma diferença de potencial baixa, ou seja, $E' < E_c$, os valores de condutividade elétrica e anisotropia dielétrica são constantes e, portanto, pode-se dizer que se comportam como um meio isotrópico.

Ao observar os resultados referentes a resistência elétrica sujeita a variações de espessura e temperatura, percebe-se que quanto maior a energia térmica presente no sistema, mais conturbado se torna o comportamento molecular no interior da amostra. E também, mais alto passam a ser os valores de resistência e capacitância à medida que a espessura aumenta.

Já ao analisar os resultados relacionados à capacitância, é possível notar que o aumento da energia térmica do sistema tem uma influência mais expressiva anteriormente a transição, de maneira que após ocorrer a reorientação molecular, a temperatura pouco interfere nos valores de capacitância. No entanto, ao avaliar a influência da energia elástica no sistema, percebe-se que quanto mais afastadas estão as superfícies, mais rápido se dá a transição no gráfico da capacitância, afinal, menores são os efeitos oriundos do ancoramento forte no meio da amostra.

REFERÊNCIAS

ATASEI, R. *et al.* Reorientation effect on the current–voltage characteristics of a nematic cell. **Physics Letters A**, ed. 39, p. 6116-6120, 2008.

DA SILVEIRA, M. B.; YEDNAK, C. A. R. Transição de Fréedericksz Através do Modelo XY. In: SEMINÁRIO DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA E TECNOLÓGICA DA UTFPR, 24., 2019, Pato Branco. **Anais do Evento**. Pato Branco: UTFPR, 2020. Disponível em: <<https://eventos.utfpr.edu.br//sicite/index/search/authors/view?firstName=MATHEUS&middleName=BEZ&lastName=DA%20SILVEIRA&affiliation=Universidade%20Tecnol%C3%B3gica%20Federal%20do%20Paran%C3%A1%2C%20Pato%20Branco%2C%20Paran%C3%A1%2C%20Brasil&country=BR>>. Acesso em: 24 abr. 2020.

de GENNES, P. G.; PROST, J. **The Physics of Liquid Crystals**. Oxford: Pergamon, 1993.

PARGELLIS, A. N. FINN, P.; GOODBY, J. W.; PANIZZA, P.; YURKE, B.; CLADIS, P. E. Defect dynamics and coarsening dynamics in smectic-C films, **Phys. Rev. A**, v. 46, p. 7765, 1992.

YURKE, B.; PARGELLIS, A. N.; KOVACS, T.; HUSE, D. A. Coarsening dynamics of the XY model. **Phys. Rev. E**, v. 47, p. 1525-1530, 1993.