



# Simulação computacional de estruturas do tipo skyrmion em cristais líquidos nemáticos

## *Simulation of skyrmion-like structures in nematic liquid crystal*

Rubens Reino Serrone, Rodolfo Teixeira de Souza

### RESUMO

Os cristais líquidos são materiais muito estudados e aplicados na tecnologia atual devido a sua alta resposta a estímulos externos. Recentemente conseguiu-se reproduzir estruturas topológicas do tipo skyrmion em cristais líquidos nemáticos, essas estruturas são muito avaliadas na tecnologia atual para armazenamento de dados devido a sua particularidade topológica. No presente trabalho buscou-se por meio de simulações de um cristal líquido nemático, forçar uma formação de skyrmion por meio do algoritmo de Metropolis e conceitos relacionados a energia livre na literatura de nemáticos. O resultado desse artigo apresenta uma suposta formação da estrutura topológica, e fenômenos da superfície interessantes.

**Palavras-chave:** Cristais líquidos, skyrmions, nemáticos.

### ABSTRACT

Liquid crystal are material with a lot of applications on technology due their high response on external fields. The scientists recently discover that is possible to reproduce skyrmion like structures using nematic liquid crystals, these structures are nowadays studied on data storage by their topological characteristics. In this work we aim to force a skyrmion-like structures using Metropolis simulation and energy nematical concepts. Results have demonstrated a supposed topological structure and interesting surfaces results.

**Keywords:** Liquid crystal, skyrmions, nematic.

## 1 INTRODUÇÃO

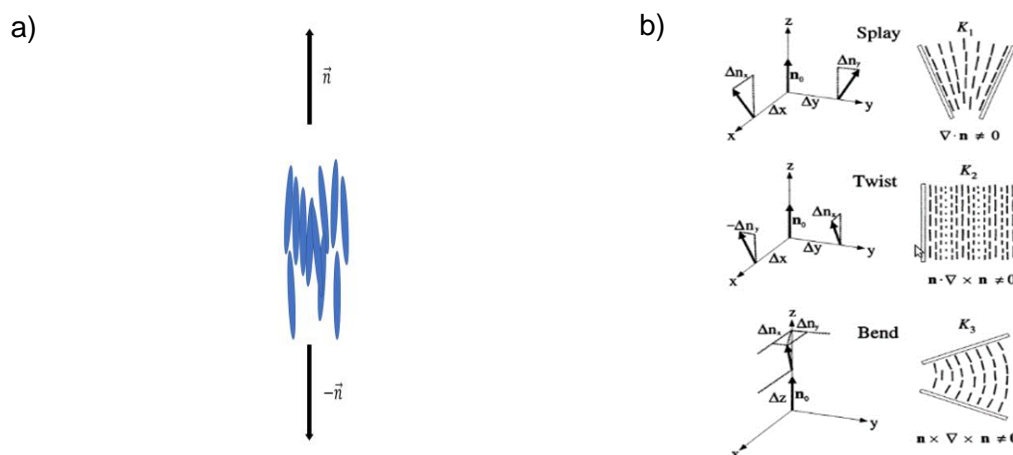
Assim se caracteriza um cristal líquido: Uma classe de materiais composta por moléculas anisotrópicas que apresentam tanto propriedades de um líquido isotrópico como a fluidez e desordem posicional, como propriedades de um sólido cristalino que possui ordenamento orientacional, esse por sua vez, determinado por meio de uma orientação média das moléculas presentes na matéria, tal orientação é denominada diretor e é representado pelo vetor  $\vec{n}$ . Como as moléculas do cristal líquido são apolares, não existe diferença no aspecto direcional do vetor, ou seja,  $\vec{n}$  e  $-\vec{n}$  são equivalentes (DE SOUZA,2012).

Classificando de acordo o grau de organização molecular dos cristais líquidos, temos então as seguintes mesofases: Nemática, esméctica e colestérica. No entanto, no presente trabalho iremos abordar os cristais líquidos em fase nemática.

A fase nemática possui orientação média bem definida e moléculas anisométricas (DA SILVA MELO,2017), já a respeito da ordem posicional, os centros de massa das moléculas são espalhados e a

correlação de suas posições perante as moléculas vizinhas variam com o tempo devido ao fenômeno de difusão (SILVA,2017).

**Figura 1 - Estrutura de moléculas nemáticas (a) e defeitos nemáticos (b)**



Fonte: Aatoria própria (2021)

## 1.1 Skyrmion

Outro fenômeno científico que tem tido bastante destaque é o skyrmion. Os skyrmions foram propostos na década de 60 por Tony Skyrme com o intuito de explicar a estabilidade das partículas através das suas propriedades topológicas (DA SILVA MELO,2017). O estudo desses materiais vem sido de grande valia para física e suas tecnologias, principalmente no campo de supercondutores magnéticos (Liu Ye-Hua and Li You-Quan,2014). Sabe-se que materiais quirais com características magnéticas, possuem grande influência na formação dos skyrmions devido à falta de simetria na estrutura cristalina, cuja característica favorece a energia livre. Dito isso, o skyrmion é uma estrutura que apresenta quiralidade, logo em certo ponto haverá uma grande quantidade de estruturas instaladas em um sistema quiral magnético (Liu Ye-Hua and Li You-Quan,2014).

## 1.2 A energia livre de Frank

Para o caso do cristal líquido nemático, se o meio é livre de distorções, temos que o diretor do sistema é uniforme. No entanto, se o sistema possui distorções, há um aumento dessa energia que muda de acordo com a forma da distorção (DE SOUZA,2012).

E uma das formas de quantificar essas distorções por meio da energia, é utilizando a equação da energia livre de Frank (Equação 1) que considera os principais defeitos nemáticos de acordo com a Figura

$$f_{FRANK} = \frac{1}{2} (K_1 [\nabla \cdot \vec{n}] + K_2 [\vec{n} \cdot \nabla \times \vec{n}]^2 + K_3 [\vec{n} \times \nabla \times \vec{n}]^2) \quad (1)$$

Onde  $K_1$  representa a constante elástica, *Splay*,  $K_2$ , *Twist*, e  $K_3$ , *Bend*. Essas constantes apontam a dificuldade do diretor no aspecto de distorção em diversas direções.



### 1.3 A energia de superfície

Quando ocorre o contato do cristal líquido nemático com outro tipo de material, nota-se um acúmulo de moléculas nessa região próxima à superfície do material, ocasionando uma quebra de simetria e consequentemente aumentando a ordem posicional da região da amostra (SERRONE,2020). Outro efeito que se consegue observar é a interação da superfície do material com as moléculas do composto nemático (SERRONE,2020).

Ambos efeitos provocam um fenômeno macroscópico de forma que se altera os diretores da vizinhança. De maneira geral, essas interações superficiais no cristal líquido, podem afetar a amostra como um todo, a esse fenômeno é dado o nome de energia de ancoramento.

A origem real vem das interações químicas das moléculas com a superfície, assim, uma relação matemática exata se torna inviável (DE SOUZA, 2009).

A função mais popular para propor o ajuste dos dados experimentais é chamada de Rapini-Papoular, e foi enunciada em 1969 (DE SOUZA, 2009) e é apresentada pela Equação (2).

$$f_s = -\frac{W}{2} (\vec{n} \cdot \vec{n}_0)^2 \quad (2)$$

Onde W é a intensidade da energia de ancoramento, e  $\vec{n}_0$  é a direção do eixo fácil imposta pela superfície.

## 2 MÉTODO

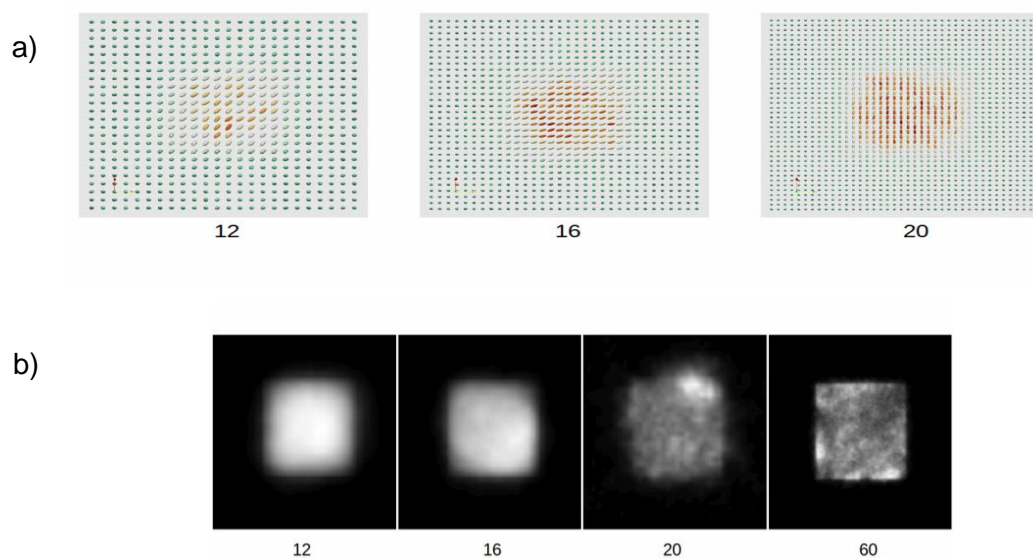
Foram realizadas simulações computacionais inspiradas no trabalho de Laura et al (CATTANEO, p. 853, 2016) modelando amostras tridimensionais de dimensões  $2L \times 2L$  com espessuras de 12 unidades. Na superfície da amostra foram criados retângulos de tamanhos  $L = 12, 16, 20$  e  $60$  unidades, com a energia de ancoramento de valor igual a  $-1$  na parte interna do retângulo, e no restante da amostra, uma energia de ancoramento de valor igual a  $1$ , fazendo com que o alinhamento na região com a energia negativa seja planar degenerado, fornecendo a possibilidade do spin girar livremente no plano. O sistema foi simulado com duas condições de contorno: ancoramento planar degenerado em  $z=0$ , e homeotrópico em  $z=12$ . Para a evolução do sistema foi utilizado o algoritmo de Metrópolis. Foram analisadas amostras com constantes elásticas iguais ( $K_1=K_2=K_3$ ), e com constantes elásticas alteradas ( $K_1=0,5K_2=0,25K_3$ ). Tanto o software quanto o sistema operacional utilizado para simulação deste trabalho são *Open Source*.

## 3 RESULTADOS

A Figura 2-(b) mostra uma representação das texturas das amostras simuladas em em polarizadores cruzados, com as constantes elásticas iguais e em uma perspectiva no eixo  $z$ . É possível notar o aumento da nitidez das amostras ao longo que o tamanho delas aumenta. Na simulação de cristais líquidos, quanto maior for a quantidade de moléculas para interação e simulação, maior será a resolução dos resultados, até porque a amostra maior se aproxima mais de um resultado condizente com a realidade. A parte escura em volta da figura nas texturas representa as moléculas posicionadas perpendicularmente em relação à superfície da amostra, já a região mais clara é a região onde a superfície inferior oferece alinhamento planar, sendo assim, mais deformada.



**Figura 2 – (a) Moléculas em relação ao eixo z. (b) Texturas retiradas do algoritmo com constantes iguais para os tamanhos 12,16,20 e 60**

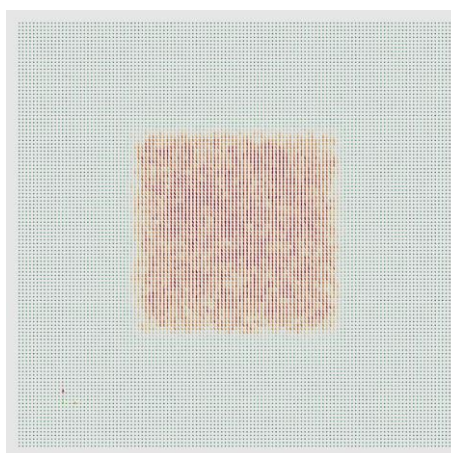


**Fonte: Autoria própria (2021).**

Nota-se que nas bordas do retângulo, as moléculas sofrem influência do externo, fazendo com que as mesmas não tomem uma orientação totalmente definida no sistema conforme as Figura 2-(a), e 2-(b). As moléculas com cor verde possuem componente no eixo z próximo a um, ao passo que as moléculas vermelhas possuem uma menor componente em z.

Com a representação das moléculas nas Figuras 2-(b), conseguimos observar que os pontos acinzentados, são moléculas na amostra que possuem componentes em z de módulo baixo, comprovando a redução da transmitância da amostra.

**Figura 3 - Ângulo das moléculas para o tamanho de 60 em relação ao eixo Z**

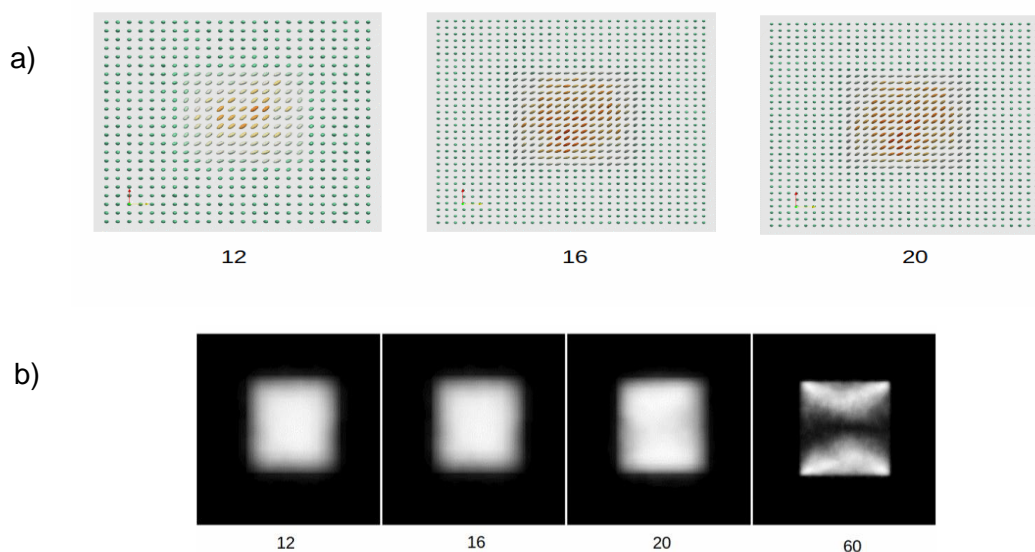




Fonte: Autoria própria (2021).

A Figura 4 representa as texturas com as constantes diferentes, sendo  $K_1=0,5K_2=0,25K_3$ . Consegu-se observar na textura de 60, um fenômeno ótico: defeitos na textura do cristal líquido, além de uma possibilidade de um suposto skyrmion no sistema.

Figura 4 – (a) Moléculas em relação ao eixo z. (b) Textura para amostras com constantes diferentes

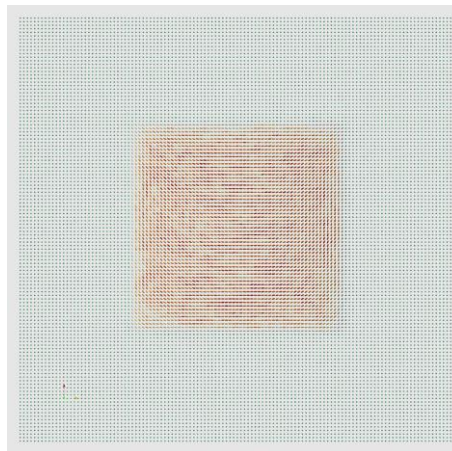


Fonte: Autoria própria (2021).

Analisando a Figura 4-(b), tem-se que as moléculas com as constantes diferentes apresentam defeitos nos vértices do retângulo da amostra, diferente do caso de constantes iguais.

Assim, na Figura 5 ficam explícitos os defeitos na borda da amostra de tamanho 60, o que se deve a diferença da energia relacionado as constantes elásticas: Com as constantes uniformes, o sistema terá uma energia constante, independente do ângulo das moléculas, já para o caso das constantes diferentes, essa afirmação não é válida.

Figura 5 - Ângulo das moléculas em relação ao eixo Z com constantes diferentes para o tamanho 60



Fonte: Autoria própria (2021).

#### 4 CONCLUSÃO

O presente trabalho foi uma tentativa de formação de estruturas do tipo skyrmion em uma amostra de cristal líquido nemático, com condições de ancoramento nas superfícies da célula. Apesar de obtermos resultados interessantes a respeito do meio líquido cristalino, não foi possível, com estes parâmetros, a simulação de uma estrutura topológica do tipo skyrmion, no entanto, algumas observações interessantes como a diferença das figuras obtidas com constantes iguais e diferentes foram notadas e além de contribuir para futuros estudos a respeito do assunto, acredita-se que para futuros trabalhos a representação do skyrmion possa ser possível.

#### AGRADECIMENTOS

Agradecemos a fundação Araucária pelo incentivo a pesquisa brasileira, agradecemos ao campus Apucarana pela oportunidade e aos amigos e familiares.

#### REFERÊNCIAS

- SILVA, Bergerson Van Hallen Vieira da. **Efeitos de superfície em cristais líquidos nemáticos confinados em geometria cilíndrica**. 2017.
- DA SILVA MELO, Thafarely Bismarck. **Skyrmion como estrutura localizada para confinamento da luz em cristais líquidos**. 2017.
- SERRONE, Rubens Reino. **Estudo dos defeitos em uma amostra nemática com ancoramento híbrido**. 2020.
- DE SOUZA, Rodolfo Teixeira. **Efeitos de Superfície em Nemáticos Confinados: Simulação Computacional e Teoria Elástica**. 2012.
- Liu Ye-Hua and Li You-Quan. **Dynamics of magnetic skyrmions**. 2014.
- CATTANEO, Laura et al. **Electric field generation of Skyrmion-like structures in a nematic liquid crystal**. *Soft Matter*, v. 12, n. 3, p. 853-858, 2016.
- DE SOUZA, Rodolfo Teixeira. **Reorientação molecular, corrente elétrica e energia de ancoramento em nemáticos**. 2009.