

Transição de Fréedericksz através do Modelo XY

Fréedericksz Transition through the XY Model

RESUMO

O comportamento temporal do perfil do diretor em uma amostra de cristal líquido nemática, submetida a um campo elétrico externo foi investigado por meio de uma simulação computacional através do modelo XY. Desta forma, foi possível determinar o campo crítico exato necessário para induzir uma reorientação molecular (Transição de Fréedericksz). Quando parâmetros, tal como temperatura e espessura são alterados, também é possível obter a transição de Fréedericksz e sua relação com espessura crítica.

PALAVRAS-CHAVE: Reorientação molecular. Cristal líquido. Transição de Fréedericksz.

ABSTRACT

The temporal behavior of the director profile in a nematic liquid crystal sample submitted to an external electric field was investigated through computational simulation using the XY model. Thus, it was possible to determine the exact critical field needed to induce a molecular reorientation (Fréedericksz Transition). When parameters, such as temperature and thickness, are changed, it is also possible to obtain Fréedericksz transition and its relation to critical thickness.

KEYWORDS: Molecular reorientation. Liquid crystal. Fréedericksz Transition.

INTRODUÇÃO

O termo cristal líquido refere-se ao estado físico da matéria que está compreendido entre o estado de líquido isotrópico e o de sólido cristalino, caracterizado por um fluido anisotrópico [1]. De maneira geral, os cristais líquidos subdividem-se em três mesofases, de acordo com suas propriedades estruturais e ordem molecular, sendo elas a nemática, a esmética e a colestérica. O presente estudo restringiu-se à nemática, a qual apresenta uma ordem orientacional, que assim como as demais, também é representada por um vetor diretor \mathbf{n} .

Uma característica inerente ao cristal líquido é o comportamento dielétrico. Afinal, uma amostra por si só já apresenta uma preferência orientacional, no entanto, com a aplicação de um campo elétrico externo, é possível modificar esta orientação, acarretando mudanças em suas propriedades óticas e elétricas [2].

Uma célula nemática uniformemente orientada pode ser distorcida através da aplicação de campo elétrico ou magnético, este fenômeno é uma transição de fase

Matheus Bez da Silveira
Matheus_cv@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. 2019.

Aprovado: 01 out. 2019.

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



de segunda ordem, que foi observado inicialmente por Fréedericksz em 1933 e, ficou conhecido como Transição de Fréedericksz [3].

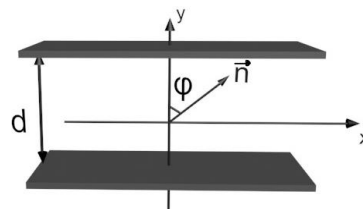
Afim de determinar e quantificar o valor exato do campo elétrico necessário para induzir a Transição de Fréedericksz, foi realizada uma simulação computacional do comportamento do perfil do diretor em uma amostra nemática em geometria plana. O modelo utilizado para desenvolver a simulação, foi o modelo XY, que representa uma aproximação discretizada do Modelo Ginzburg-Landau [4]. Portanto, em virtude das características geométricas da amostra, as distorções consideradas serão apenas a *splay* (divergência) e *bend* (flexão).

O trabalho foi organizado da seguinte forma, inicialmente apresenta-se a seção metodologia, responsável por uma abordagem teórica a respeito do tema, posteriormente a seção de resultados, onde são expressos e debatidos os resultados das simulações. A última seção é destinada as conclusões finais.

METODOLOGIA

Para o estudo da transição de Fréedericksz foi considerada uma célula de cristal líquido nemático com espessura (d), comprimento longo na direção x e, sujeita apenas à deformações planares, ou seja, as propriedades da amostra independem da direção y . Na célula nemática, o vetor diretor \vec{n} possui uma ordem de orientação preferencial, que depende tanto de condições de ancoramento impostas pelas superfícies da célula, quanto da intensidade de um campo magnético ou elétrico aplicado.

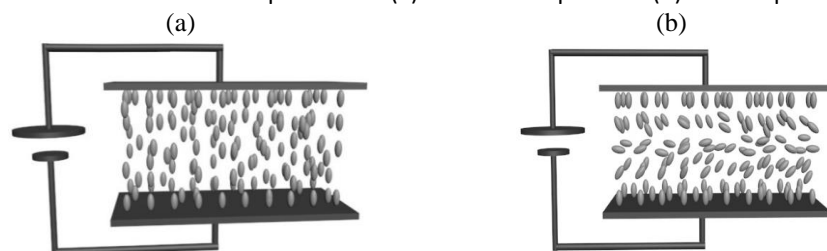
Figura 1 – Representação esquemática de uma amostra de cristal líquido nemático.



Autor: Autoria própria (2019).

A transição de Fréedericksz representa uma transição de fase de segunda ordem, em que na presença dos campos elétrico ou magnético de baixa magnitude a orientação do diretor \vec{n} não se altera, permanecendo com uma orientação uniforme. A distorção ocorre somente quando os valores de campo aplicado ultrapassam um valor crítico, conforme ilustrado na Figura 2.

Figura 2 – Representação do comportamento das moléculas de um cristal líquido quando o valor crítico do campo elétrico (a) não foi ultrapassado (b) foi ultrapassado.



Autor: Autoria própria (2019).

Para determinar o campo elétrico crítico (E_c), ou seja, o valor de campo no qual ocorre a distorção, foi utilizado o modelo XY [5-7]. Também foram adotadas duas condições de contorno: a primeira consiste em adotar 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) [4]. Desta forma, pode-se expressar a variação temporal do comportamento de (φ_i) através da seguinte equação diferencial ordinária:

$$\gamma \frac{d\varphi_i}{dt} = -K \sum_j \text{sen}(\varphi_i - \varphi_j) - \eta_i, \quad (1)$$

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 [1,2]. O ruído de Langevin (η_i) [1], é expresso pela seguinte equação:

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

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:

$$\varphi_i(t + \Delta t) = \varphi_i(t) - \Delta t \left\{ \eta_i(t) + \frac{k}{\gamma} \sum_j \text{sen}[\varphi_i(t) - \varphi_j(t)] + \epsilon_a E^2 \cos^2[\varphi_i(t)] \right\}, \quad (3)$$

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.

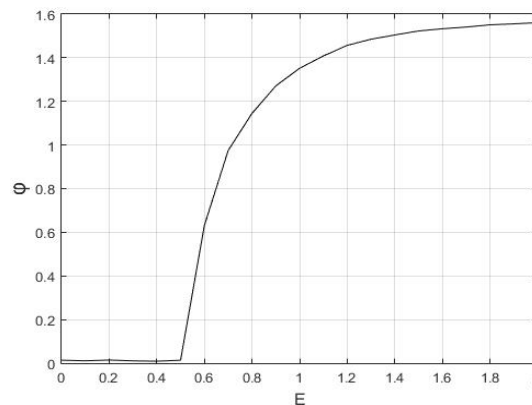
Para esta simulação a soma em j foi realizada ao longo dos oito vizinhos mais próximos de i , portanto, quanto maior for a espessura (d) entre as superfícies, onde está contido o cristal líquido, maior será a quantidade de somas efetuadas.

RESULTADOS E DISCUSSÕES

Neste estudo simulacional teórico, foram utilizadas grandezas adimensionais para a realização dos cálculos, sendo estas, reduzidas de seus respectivos valores reais [2,4].

Fixando-se inicialmente valores para a temperatura (C_l) e espessura (d), obtêm-se o comportamento do perfil do diretor (φ) variando em função da magnitude do campo elétrico aplicado.

Figura 3 – Representação do perfil do diretor antes e depois da Transição de Fréedericksz para $d = 11$ e, $C_l = 0,1$.



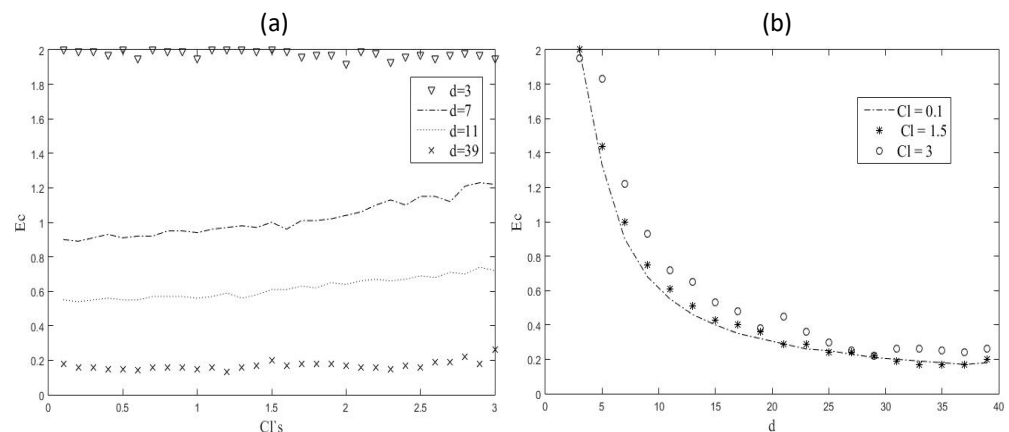
Fonte: Autoria própria (2019).

Na figura 3, o perfil do diretor (φ) permanece praticamente constante para baixos valores de campo elétrico, indicando que a energia elástica no meio da amostra prevalece sobre a imposição do campo elétrico aplicado. Desta forma, as moléculas permanecem perpendicularmente orientadas à superfície. Quando o campo elétrico ultrapassa um determinado valor crítico (E_c), no meio da amostra, a energia imposta pela diferença de potencial supera, tanto a energia elástica do meio, quanto a resistência estabelecida pelas superfícies. Logo, as moléculas se reorientem paralelamente as superfícies da amostra.

Como mencionado na seção anterior, a distorção do diretor \mathbf{n} depende tanto do campo elétrico submetido, quanto da temperatura e espessura da amostra. A relação entre estas grandezas contribui para a determinação do campo elétrico crítico, o que torna possível estudar a Transição de Fréedericksz em relações diretas com estes fatores.

Variando-se o campo elétrico (E) de 0 até 2, a espessura (d) de 3 até 39 e a temperatura (C_l) de 0 até 3, é possível observar o seguinte comportamento:

Figura 4 – A figura (a) representa a relação entre o campo elétrico crítico (E_c) e a variação de temperatura (C_l) para diferentes espessuras. Já a figura (b) representa a relação entre o campo elétrico crítico (E_c) e a variação de espessura (d) para diferentes temperaturas (C_l 's).

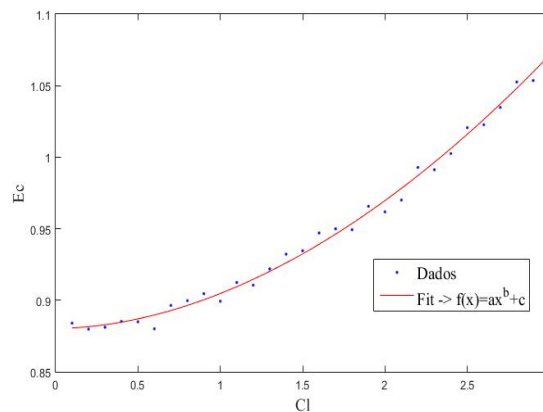


Fonte: Autoria própria (2019).

Na Figura 4 (a), conforme a espessura (d) da célula nemática aumenta, o campo necessário para ocorrer a transição diminui, afinal, quanto mais distantes as moléculas estão das superfícies da amostra, menor será a resistência a rotação causada pela energia de ancoramento, e assim, menor o campo elétrico crítico necessário para induzir a transição de Fréedericksz.

Ao analisar a Figura 4 (b), percebe-se que conforme a espessura aumenta, o campo crítico necessário para que ocorra a transição diminui. Como o valor de campo decai bruscamente para as variações iniciais de espessuras e, suaviza seu comportamento após atingir um certo ponto, nota-se a existência de uma espessura específica responsável pela ocorrência deste fenômeno. Esta espessura será denominada espessura crítica (dc) e, pode ser determinada através de métodos matemáticos. Para este estudo, foi obtida uma espessura crítica $dc = 7$. Na figura 5, é possível observar a relação entre o campo elétrico e a temperatura para a espessura crítica obtida.

Figura 5 – Relação entre o Campo Crítico (E_c) e a temperatura (C_l) para a espessura crítica ($dc=7$).



Fonte: Autoria própria (2019).

A partir da Figura 5, é perceptível que para a espessura crítica ($dc=7$) há uma relação de dependência entre campo elétrico crítico e temperatura, que pode ser expressa pela interpolação dos pontos simulados através de uma função $f(x)$ com coeficiente b avaliado em 1,8734, logo percebe-se que há uma aproximação ao padrão quadrático.

A energia elétrica é responsável pela reorientação molecular, já as energias elástica e térmica agem no sentido de dificultar a ocorrência deste fenômeno. Sendo assim, conforme a temperatura aumenta, é necessário um maior valor de campo crítico para que ocorra a transição, como demonstrado na Figura 5.

CONCLUSÕES

As análises desenvolvidas ao longo da simulação da amostra de cristal líquido nemático, confinada entre duas placas paralelas, possibilitaram a determinação do campo elétrico crítico que permite induzir uma reorientação molecular na amostra (orientação uniforme para não uniforme) conhecida como Transição de Fréedericksz.

No entanto, o valor correspondente a este campo também pode ser influenciado pelas variações da temperatura e da espessura da amostra. Uma vez realizada essas variações, foi possível determinar o campo crítico necessário para induzir essa transição e sua relação com esses parâmetros.

De maneira geral, quanto maior é a distância entre as placas, menores serão os valores de campo elétrico necessários para ocorrer a transição. Já para o caso da temperatura, observa-se que conforme a energia térmica aumenta, é necessário um maior valor de campo elétrico para induzir a transição.

O presente estudo promoveu a elaboração de uma amostra de cristal líquido nemático submetida a um campo elétrico externo, através de simulação computacional do comportamento do diretor, e também, o estudo do comportamento do diretor na amostra. Este estudo inicia a abordagem de problemas em que a reorientação molecular no meio nemático se faz importante, como por exemplo, o estudo da resposta elétrica neste tipo de amostra, sendo este, o alvo de estudo na sequência deste trabalho.

REFERÊNCIAS

- [1] BARBERO, G.; EVANGELISTA, L. R. **An Elementary Course on the Continuum Theory for Nematic Liquid Crystals**. Singapore: World Scientific, 2001.
- [2] de GENNES, P. G.; PROST, J. **The Physics of Liquid Crystals**. Oxford: Pergamon, 1993.
- [3] CHANDRASEKHAR, S. **Liquid Crystals**. Cambridge: Cambridge University Press, 1977.
- [4] 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.
- [5] PASINI, P.; ZANNONI C. **Advances in the Computer Simulations of Liquid Crystals**. Erice: Kluwer Academic Publishers, 1998.
- [6] PASINI, P.; ZANNONI, C.; ZUMER, S. **Computer Simulations of Liquid Crystals and Polymers**, Erice: Kluwer Academic Publishers, 2003.
- [7] 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.