



Estudo de cristais líquidos: Propriedades elásticas e problemas clássicos

Study of liquid crystals: Elastic properties and classical problems

Matheus Pereira Correa¹, Rodolfo Teixeira de Souza²

RESUMO

Os cristais líquidos (CL) são classificados como fluidos complexos que possuem grau de ordem orientacional de longo alcance dos sólidos cristalinos, porém com a desordem de longo alcance dos líquidos isotrópicos. Assim, não apresentam a clássica estrutura cristalina rígida dos sólidos. Geralmente, quando o cristal líquido é confinado em uma superfície, plana, cilíndrica, esféricas, etc., ela o induz a mostrar deformações que se espalham por toda a amostra. Para estudar esses materiais, do ponto de vista teórico, é imprescindível ter conhecimento da equação de Euler-Lagrange que dará início aos cálculos teóricos para minimizar a energia livre de Frank, já que a orientação do vetor diretor é obtida a partir desse cálculo. Neste trabalho, serão abordadas as propriedades elásticas dos CL's, ou seja, as deformações do cristal líquido em resposta a efeitos de superfície, além de algumas aplicações, revisitando problemas clássicos dos cristais líquidos, os quais envolvem amostras em células nemáticas em situações de ancoramento forte/fraco e amostras influenciadas pela presença de um campo elétrico, onde será abordado a criticalidade da transição de Fréedericksz.

PALAVRAS-CHAVE: Cristal Líquido Nemático; Efeitos de Superfície; Transição de Fréedericksz.

ABSTRACT

Liquid crystals (LC) are classified as complex fluids that have the long-range degree of orientational order of crystalline solids, but with the long-range disorder of isotropic liquids. Therefore, they do not have the classic rigid crystalline structure of solids. Generally, when the liquid crystal is confined to a surface, flat, cylindrical, spherical, etc., it induces it to show deformations that spread throughout the sample. To study these materials, from a theoretical point of view, it is essential to have knowledge of the Euler-Lagrange equation that will begin the theoretical calculations to minimize Frank's free energy since the direction vector orientation is obtained from this calculation. In this work, the elastic properties of CL's will be addressed, that is, the deformations of the liquid crystal in response to surface effects, as well as some applications, revisiting classic problems of liquid crystals, which involve samples in nematic cells in strong/weak anchoring situations and samples influenced by the presence of an electric field, where the criticality of the Fréedericksz transition will be addressed.

KEYWORDS: Nematic Liquid Crystals; Surface Effects; Fréedericksz's transition.

¹ Bolsista do(a) CNPq. Universidade Tecnológica Federal do Paraná, Apucarana, Paraná, Brasil. E-mail: matcor@alunos.utfpr.edu.br. ID Lattes: 8768337390251402.

² Docente do Departamento Acadêmico de Física. Universidade Tecnológica Federal do Paraná, Apucarana, Paraná, Brasil. E-mail: rodolfosouza@utfpr.edu.br. ID Lattes: <http://lattes.cnpq.br/6095448714892816>.



INTRODUÇÃO

Os cristais líquidos são fluídos complexos de grande importância para o nosso dia a dia com aplicações tecnológicas como mostradores de celulares e tablets. São materiais classificados como fluídos complexos por apresentarem fase intermediária entre o estado sólido e líquido.

A fase ordenada mais simples é a fase nemática e as moléculas, que de forma geral, possuem formato de bastão ou disco. Elas apresentam direção preferencial de ordenamento, sendo representado por um vetor unitário e chamado de vetor diretor \vec{n} . (NASCIMENTO, 2018).

Ainda, os cristais líquidos podem ser encontrados em diferentes formatos, como cilindros, cubos e retângulos. (FIGUEIREDO, 2021). Onde surge o interesse de, posteriormente, se aprofundar em amostras com coordenadas cilíndricas, diferentemente dos problemas encontrados neste trabalho.

A seguir, será estudado como o perfil desse diretor reage devido à presença de agentes externos, como superfícies ancoradas e/ou campos elétricos. E para resolver os determinados problemas, parte-se da minimização da densidade de energia livre de Frank para compreender o comportamento do cristal líquido. E para isto, utiliza-se a Equação de Euler-Lagrange.

EQUAÇÃO DE EULER-LAGRANGE

Dado o problema matemático

$$S = \int_{x_1}^{x_2} f[y(x), y'(x); x] dx, \quad (1)$$

queremos encontrar qual a solução $y(x)$ que torna a integral a menor possível conhecendo os pontos extremos. A solução deste problema é a base do Cálculo Variacional, ou seja, o cálculo que se propõe ao estudos de funcionais, como o apresentado na [Equação \(1\)](#).

Com alguns passos matemáticos, podemos mostrar que a função $y(x)$ que minimiza a integral acima é também solução da equação:

$$\frac{\partial F}{\partial y} - \frac{d}{dx} \left(\frac{\partial F}{\partial y'} \right) = 0, \quad (2)$$

conhecida como Equação de Euler-Lagrange.

A [Equação \(2\)](#) é usada para encontrar as equações de movimento, ou as trajetórias, que minimizam (ou maximizam) uma determinada função integrada ao longo de um intervalo de espaço.

PROPRIEDADES ELÁSTICAS E A ENERGIA LIVRE DE FRANK

As propriedades elásticas dos cristais líquidos relacionam-se às respostas mecânicas dos CLs quando submetidos a agentes externos. A Energia Livre de Frank é comumente utilizado para estudar tais propriedades. Os termos na energia de livre estão associados a diferentes tipos de deformação: splay (divergência), twist (torção), bend (flexão) e um termo das contribuições da superfície. As constantes são chamadas, respectivamente, de K_{11} , K_{22} e K_{33} . (SOUZA, 2009). A energia livre de Frank pode ser escrita na forma de



$$f_{Frank} = \frac{1}{2}K_{11} (\vec{\nabla} \cdot \vec{n})^2 + \frac{1}{2}K_{22} (\vec{n} \cdot \vec{\nabla} \times \vec{n})^2 + \frac{1}{2}K_{33} (\vec{n} \times \vec{\nabla} \times \vec{n})^2, \quad (3)$$

o termo "splay" calcula a deformação na qual as orientações moleculares em um cristal líquido se afastam ou se aproximam umas das outras ao longo de uma direção. Na expressão da energia livre o termo é representado por $(\nabla \cdot \vec{n})$. (YEDNAK, 2009). O "twist" relaciona uma deformação na qual as orientações moleculares em um cristal líquido giram em torno de um eixo específico (como rotações de moléculas em torno de seu eixo longitudinal) representado por $(\vec{n} \cdot \nabla \times \vec{n})$ e por fim o termo de bend refere-se à curvas ou desdobramentos ao longo de um plano específico, na expressão é observado em $(\vec{n} \times \nabla \times \vec{n})$.

E quando existe a ação de um campo elétrico e um termo de superfície a densidade de energia torna-se

$$f = f_{Frank} - \frac{1}{2}\epsilon_a (\vec{n} \cdot \vec{E})^2 - \frac{W}{2} \vec{n} \cdot \vec{n}_0, \quad (4)$$

onde ϵ_a representa a constante de anisotropia dielétrica, W é a intensidade da interação com a superfície e \vec{n}_0 é a orientação induzida pela superfície. (SOUZA, 2012). Como condições de contorno para com as equações tem-se: Condições de contorno de ancoramento forte, onde $\vec{n}_s = \vec{n}_0$, ou seja, o diretor na superfície assume a orientação imposta pela superfície porque a energia de interação com a superfície é muito maior quando comparada ao volume. Por outro lado, se a energia é da mesma ordem, chamamos esse caso de ancoramento fraco e as condições de contorno podem ser dadas por

$$-\frac{\partial f}{\partial \theta'} + \frac{d\xi_1}{d\theta_1} = 0 \text{ e } \frac{\partial f}{\partial \theta'} + \frac{d\xi_2}{d\theta_2} = 0, \quad (5)$$

visto que $\xi_i(\theta_i)$ é a energia de ancoramento por unidade de área. (SOUZA, 2009). Assim, o trabalho é resolver a equação de Euler Lagrange com as condições de borda devidamente ajustadas de acordo com as condições desejadas. A grande maioria dos problemas de interesse, atualmente, carecem de algum método numérico para minimizar a energia livre. No entanto, alguns problemas clássicos são analiticamente tratáveis e ajudam o leitor a compreender como se tratam e quais alguns fenômenos que podem surgir nesse tipo de sistema. A seguir, abordaremos dois desses problemas, discutindo conceitos bastante gerais e pertinentes, como transição de fase.

RESULTADOS E DISCUSSÕES

No que segue, apresentamos dois resultados bastante clássicos da literatura de teoria elástica, um envolvendo efeitos de superfície e outro com efeitos de campo externo.

CÉLULA HÍBRIDA - ANCORAMENTO FORTE/FRACO

Em uma amostra de cristal líquido na forma de um slab com condições híbridas de ancoramento, ou seja, em uma parede tem-se ancoramento forte ($z = -d/2$) e $\theta_1 = 0$ e ancoramento fraco homeotrópico na outra extremidade, ($z = d/2$) e $\theta_0 = \pi/2$. (SOUZA, 2009).

Considera-se que o diretor deve ser função apenas de z , podendo ser expresso na forma



de $n(\vec{x}, z) = \cos \theta(x, z)\hat{x} + \sin \theta(x, z)\hat{z}$, e ao utilizar a aproximação de uma única constante elástica, a energia livre é escrita por:

$$f[\theta(z)] = \frac{1}{2}k \left(\frac{\partial \theta}{\partial z} \right)^2. \quad (6)$$

Minimizando pela equação de Euler-Lagrange, encontra-se uma equação diferencial ordinária

$$\frac{1}{2}k \frac{d^2 \theta}{dz^2} = 0, \quad (7)$$

que pode ser resolvida através da técnica de separação de variáveis, e a partir das condições previamente descritas, obtém-se o perfil do diretor

$$\theta(z) = \theta_s \left(\frac{z}{d} + \frac{1}{2} \right). \quad (8)$$

Agora é necessário determinar θ_s , ou seja, o ângulo na superfície com ancoramento fraco. Para isso utilizamos a informação que $\xi(\theta_s) = (W/2 \cos^2 \theta_s)$, juntamente da condição de contorno para um ancoramento fraco, Eq. (5), tem se

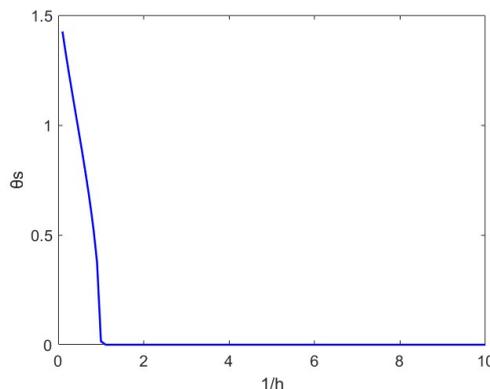
$$K \frac{\theta_s}{d} - \frac{W}{2} \sin 2\theta_s = 0, \quad (9)$$

em que é definindo a constante do comprimento de extrapolação $L = K/W$, o qual mede o quanto seria necessário extrapolar o comprimento para que o ancoramento seja forte. Caso o comprimento seja 0, tem-se uma situação de ancoramento forte e quanto maior o valor L, menor a energia de ancoramento será. A Equação (9) em termos do comprimento é

$$\theta_s = \frac{h}{K} \sin 2\theta_s, \quad (10)$$

sendo $h = d/L$, obtém-se uma equação transcendental. A partir da Figura 1 observa-se que, quando a espessura da amostra d for maior que o comprimento de extrapolação, a equação admite diversas soluções, do contrário, apenas a trivial.

Figura 1 – Comportamento de θ_s em função de $1/h$



Fonte: Autoria própria.



TRANSIÇÃO DE FRÉEDERICKSZ

Na transição de Fréedericksz, existe a ação de um campo elétrico externo sobre a amostra. Em uma amostra, também na forma de slab, com espessura d , e placas situadas em $z_1 = d/2$ e $z_2 = -d/2$. Em situações de ancoramento forte o diretor na superfície assume $\theta(d/2) = \theta(-d/2) = 0$. Admite-se a anisotropia dielétrica como positiva e o campo sendo uniforme e intensidade E no sentido positivo do eixo z . (SOUZA, 2009). Assim a energia livre é dada na forma de

$$f = \frac{k}{2} \left[\left(\frac{d\theta}{dz} \right)^2 - \frac{\varepsilon_a E^2}{k} \sin^2 \theta \right]. \quad (11)$$

Minimizando essa energia livre e utilizando a informação do comprimento de coerência $\xi^2 = k/\varepsilon_a E^2$, obtém-se:

$$\xi^2 \theta''(z) + \sin \theta \cos \theta = 0. \quad (12)$$

Para trabalhar um pouco mais com essa equação não-linear, multiplica-se ambos os lados da equação por $\theta'(z)$, simplificando-a para

$$\xi^2 \theta'(z)^2 + \sin^2 \theta = C, \quad (13)$$

visto a igualdade do ancoramento nas duas placas, $\theta(z)$ deve ser uma função par onde seu máximo é em $z = 0$, ou seja $\theta'(z=0) = 0$, a partir dessa condição de contorno tem-se o valor de $C = \sin^2 \theta_m$. Caso $\theta_m \neq 0$, a amostra encontra-se distorcida de modo que $\theta(z)$ é uma função que depende de z . Do contrário, se $\theta_m = 0$, $\theta(z) = 0$, amostra apresenta-se completamente orientada.

Assim, substituindo θ por x , e como a solução é par, considera-se apenas a parte positiva, e propondo uma mudança de variável: $\sin x = \sin \theta_m \sin \psi$, obtemos, a partir de das condições, $\theta(d/2) = 0$ e $\theta(0) = \theta_m$:

$$\int_0^{\frac{\pi}{2}} \frac{d\psi}{\sqrt{1 - \sin^2 \theta_m \sin^2 \psi}} = K[\sin^2 \theta_m] = \frac{d}{2\xi}, \quad (14)$$

onde $K = [\sin^2 \theta_m]$ é a integral elíptica completa.

Para determinar se a equação fornece solução não trivial, examina-se o comportamento de θ_m no limite, ou seja, $\theta_m \rightarrow 0$. No limite, a integral tem valor de $\pi/2$

$$\frac{\pi}{2} = \frac{d}{2\xi}, \quad (15)$$

toma-se $\xi = \xi_c$, pois esta é a representação de ξ para $\theta_m \rightarrow 0$, e $\xi^2 = k/E^2 \varepsilon_a$, logo o campo crítico pode ser escrito em função de ξ_c

$$E_c = \frac{\pi}{d} \sqrt{\frac{K}{\varepsilon_a}}. \quad (16)$$

Se $E > E_c$ em $z = 0$, no meio da placa o campo distorce o diretor, distorção esta que aumenta a medida em que o campo aumenta. Porém, se $E < E_c$ tem-se a configuração trivial, orientação



totalmente paralela às placas.

CONCLUSÃO

No presente trabalho, foi realizada uma análise teórica sobre o comportamento dos cristais líquidos, focada nas influências de superfícies ancoradas e campos externos. Utilizou-se a abordagem da teoria elástica, com a energia livre de Frank como modelo central para descrever as propriedades desses materiais. Primeiramente, examinou-se uma célula híbrida com condições de ancoramento híbridas nas superfícies. A solução para o perfil do diretor foi encontrada e revelou-se a dependência dela com do comprimento de extrapolação. Esse comportamento, análogo a uma transição de fase contínua, fornece a relação entre a espessura da amostra e a intensidade da energia de ancoramento. Em seguida, abordou-se a Transição de Fréedericksz, onde um campo elétrico externo influencia a orientação dos cristais líquidos. A análise permitiu identificar um campo elétrico crítico, a partir do qual ocorre uma transição na orientação do diretor. Neste caso, o campo crítico é função da anisotropia dielétrica, da constante elástica, e da espessura da amostra. Esses estudos teóricos fornecem ferramentas matemáticas e computacionais básicas para compreender o comportamento versátil dos cristais líquidos através de modelagens matemáticas mais complexas. Além disso, a partir desses problemas clássicos, pretende-se passar a abordar problemas mais pertinentes na fronteira do conhecimento dessa área.

AGRADECIMENTOS

Ao Cnpq pelo suporte financeiro fornecido.

CONFLITO DE INTERESSE

Não há conflito de interesse.

REFERÊNCIAS

- FIGUEIREDO, A. Fluidos complexos na matéria condensada: os cristais líquidos. Revista Brasileiro de Ensino de Física, SciELO Brasil, v. 43, 2021.
- NASCIMENTO, E. Modelos microscópicos para cristais líquidos nemáticos. Tese Doutorado em Física - Universidade de São Paulo. São Paulo, 2018.
- SOUZA, R. Efeitos de Superfície em Nemáticos Confinados: Simulação Computacional e Teoria Elástica. Tese Doutorado em Física - Universidade Estadual de Maringá. Maringá, 2012.
- SOUZA, R. Reorientação Molecular, Corrente Elétrica e Energia de Ancoramento em Nemáticos. Tese Mestrado em Física - Universidade Estadual de Maringá. Maringá, 2009.
- YEDNAK, C. Problemas de Contorno e Efeitos de Superfície em Células Nemáticas: pequenas distorções. Tese Doutorado em Física - Universidade Estadual de Maringá. Maringá, 2009.