

**UNIVERSIDADE
ESTADUAL DE MARINGÁ**

PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA

DISSERTAÇÃO DE MESTRADO

**ESTUDOS EM MEIO LÍQUIDO CRISTALINO COMO
UM LABORÁTÓRIO PARA ANÁLISE COSMOLÓGICA**

BRENO FERRAZ DE OLIVEIRA

**Orientadores: Profa. Dra. Hatsumi Mukai
Prof. Dr. Paulo Ricardo Garcia Fernandes**

Maringá - PR, maio de 2006

Para meus pais
Elizabeth Ferraz de Oliveira
Nelson Alcides de Oliveira

Conteúdo

Agradecimentos	3
Resumo	4
Abstract	5
Introdução	6
1 Cristais Líquidos	8
1.1 Uma nova mesofase da matéria	8
1.2 Mas, o que é cristal líquido?	9
1.2.1 Cristais Líquidos Termotrópicos (CLT)	10
1.2.2 Cristais Líquidos Liotrópicos (CLL)	10
1.3 Ordem Orientacional	12
1.4 Classificação das mesofases dos cristais líquidos	13
1.4.1 A fase nemática	13
1.4.2 Fase isotrópica	15
1.5 Teoria elástica do contínuo	15
1.5.1 Declinações	16
1.6 Defeito topológico do tipo corda em cristais líquidos	20
2 Defeitos Topológicos no Universo Primordial	23
2.1 Uma descrição qualitativa dos defeitos topológicos	23
2.2 Uma descrição quantitativa dos defeitos topológicos	24
2.2.1 Domínios de Parede	25
2.2.2 Cordas Cósmicas	26
2.2.3 Monopólos	30
2.3 O Mecanismo de Kibble	30
2.4 Mecanismo de Kibble e o Hélio Superfluido	32
2.5 Mecanismo de Kibble e os Cristais Líquidos Termotrópicos	32

3	Diagrama de Fases e Técnica Experimental	34
3.1	Diagrama de fases	34
3.2	Microscopia óptica de luz polarizada (MOLP)	35
3.3	Produção dos defeitos	37
3.4	Intensidades de declinações	38
4	Análise dos Resultados	41
4.1	Espessura do capilar versus intensidades de declinações do defeito	41
4.2	Correlação entre defeitos e antidefeitos	42
	Conclusões e Perspectivas	46
	Apêndice A: Densidade de Energia Elástica de Frank[35]	48
	Apêndice B: Configuração do Diretor ao Redor de uma Declinação	51
	Apêndice B: Grupos de Simetria	53
	Apêndice D: Dados Experimentais do Cristal Líquido Liotrópico	54
	Referências Bibliográficas	60

Agradecimentos

Primeiramente à meus pais que sempre me incentivaram em tudo com muito amor e carinho.

Aos meus orientadores, Professora Hatsumi Mukai e o Professor Paulo Ricardo Garcia Fernandes, pela orientação, paciência e apoio.

Ao Professor Luiz Roberto Evangelista pelas oportunidades e ensinamentos dados ao longo da minha vida acadêmica, bem como ao apoio dado para a defesa do presente trabalho.

Aos Professores Renio dos Santos Mendes e Perseu Angelo Santoro pelo auxílio dado para a conclusão deste trabalho.

À Professora Suhaila Maluf Shibli e ao projeto do Milênio por parte do Laurato de Potássio utilizado para o desenvolvimento deste trabalho.

Aos meus irmãos Rafaelle Ferraz de Oliveira, Célio Henrique Ferraz de Oliveira, Lígia Ferraz de Oliveira e Renan Guilherme Ferraz de Oliveira pelo apoio.

À minha namorada Milena de Carvalho Iwazaki pelo amor e paciência.

Aos meus três grandes amigos: Marcelo Freitas de Andrade, Márcio Anicete dos Santos e a Janaina Franciele Camargo que sempre me deram muito apoio.

Ao Gustavo Sanguino pela amizade e por toda ajuda na parte computacional, a Ilzamara Cardoso da Silva pelos conselhos e incentivos e ao Manoel Messias Alvino de Jesus por toda ajuda e companheirismo.

À Akiko Nisida por todos os serviços prestados que muito contribuíram para realização deste mestrado.

A CAPES pela bolsa de mestrado. Ao CNPq, Fundação Araucária pelos demais financiamentos.

E a todas pessoas que de uma forma direta ou indireta contribuíram para realização deste trabalho.

Resumo

Há observações do nosso Universo que estão em excelente concordância com a teoria do *Big-Bang*, onde nesta teoria encontramos a presença de um modelo que descreve a formação de estruturas no Universo, tais como galáxias e aglomerados de galáxias, utilizando o conceito de defeitos topológicos, em particular o defeito tipo corda cósmica. Em 1976, Kibble criou um modelo que descreve a formação destes defeitos topológicos no Universo Primordial. Esta descrição é conhecida como Mecanismo de Kibble. E as idéias centrais deste mecanismo podem ser aplicadas para outros sistemas; como os sistemas de matéria condensada, ou seja, tais sistemas possuem um comportamento universal que só dependem do espaço dimensional e do parâmetro de ordem espacial. Nesse âmbito, apresentaremos defeitos topológicos do tipo corda cósmica em um Cristal Líquido Liotrópico, onde utilizaremos o Mecanismo de Kibble para descrever tais defeitos.

Abstract

There are observations of our Universe that are in excellent agreement with the theory of the *Big-Bang*, where in this theory we found the presence of a model that describes the formation of structures in the Universe, such as, galaxies and clusters of galaxies, utilized the concept of topological defects, in particular cosmic string defect. In 1976, Kibble proposed one model that describes the formation of these topological defects in the Early Universe. This description is usually referred as Kibble Mechanism. And the central ideas of this mechanism can be applied for other systems; as the systems of condensed matter, in other words, such systems possess one universal behavior that only depend on the dimensional space and of the parameter of space order. In this way, we will present topological defects of the kind cosmic string in the Lyotropic Liquid Crystal, where we will use the Kibble Mechanism to describe such defects.

Introdução

*To see a world in a grain of sand*¹ não é apenas um verso do poema *Auguries of Innocence* do poeta inglês William Blake. Mas, talvez seja algo possível de ser realizado fisicamente num sentido análogo.

No presente trabalho, apesar de não vermos o mundo num grão de areia, propomos utilizar o sistema líquido cristalino, como um laboratório cosmológico.

Neste âmbito, testaremos um modelo que descreve um evento ocorrido no Universo Primordial numa mistura ternária (Laurato de Potássio - KL, Decanol - DeOH, e água pesada - D₂O) que nada mais é do que um cristal líquido liotrópico (CLL). E o modelo que pretendemos testar é conhecido como Mecanismo de Kibble[1].

Este mecanismo é bastante interessante, pois é utilizado tanto para descrever a formação de defeitos topológicos no Universo Primordial, bem como também para descrever a formação de defeitos topológicos em sistemas de matéria condensada, como o hélio superfluido[2] e cristais líquidos termotrópicos (CLT)[3].

A técnica experimental utilizada é a Microscopia Óptica de Luz Polarizada (MOLP), e os defeitos topológicos que analisaremos no CLL são os do tipo corda.

Esta proposta de trabalho é inovadora no âmbito da aplicação cosmológica em Cristais Líquidos Liotrópicos, que são sintetizados em nosso próprio laboratório.

O presente trabalho está exposto da seguinte forma:

O capítulo 1 foi dedicado aos Cristais Líquidos, onde a primeira parte consta de uma breve revisão histórica, definição, e tipos de Cristais Líquidos. Posteriormente discute-se a ordem orientacional, classificação dos CLs, e a partir deste ponto enfocaremos nossa atenção aos cristais líquidos liotrópicos, mais precisamente às mesofases que iremos utilizar neste trabalho. Na seção 1.5 apresentaremos uma descrição da teoria elástica do contínuo, onde mostraremos que sob algumas condições os CL apresentam os defeitos topológicos do tipo corda (declinações). E na seção seguinte descreveremos tais defeitos utilizando a linguagem de topologia.

No capítulo 2, apresentaremos os defeitos topológicos no âmbito da cosmologia. Sendo tais defeitos os do tipo domínios de parede (no sentido que uma parede separa diferentes domínios), cordas cósmicas e monopólos. Onde estes foram formados no Universo Primordial devido a uma transição de fase com quebra espontânea de simetria. À seção 2.3 destinamos a descrição

¹Para ver um mundo em um grão de areia.

do mecanismo de Kibble. E nas duas últimas seções apresentaremos a idéia geral dos principais trabalhos publicados em matéria condensada sobre a utilização do mecanismo de Kibble.

A descrição da técnica experimental, preparação da amostra, produção de defeitos do tipo corda e identificação das intensidades dos defeitos no cristal líquido liotrópico serão apresentadas no capítulo 3.

O capítulo 4 é dedicado à análise dos resultados, onde discutiremos a relação entre a intensidade dos defeitos e a espessura dos capilares que continham a nossa amostra de CLL e mostraremos que a correlação entre defeitos e antidefeitos possui a mesma correlação descrita pelo mecanismo de Kibble para o Universo Primordial.

E, em seguida, apresentaremos as Conclusões e Perspectivas.

No apêndice A descreveremos detalhadamente a densidade de energia de Frank para um cristal líquido nemático não quiral. No apêndice B mostraremos como construir a configuração do diretor ao redor de uma declinação, utilizando a solução conhecida como declinação axial encontrada no capítulo 1. No apêndice C trataremos de uma descrição dos principais grupos de simetria. E, finalmente, no apêndice D serão apresentadas as demais fotos de texturas utilizadas para o desenvolvimento de parte do presente trabalho.

Com relação a notação, adotamos que:

Índices latinos i, j, k, \dots , variam de 1 - 3 e representam três coordenadas espaciais.

Adotamos o sistema de unidades “Heaviside”, onde ($c = \hbar = k_B = 1$).

Capítulo 1

Cristais Líquidos

Este capítulo destina-se a introduzir um breve histórico dos cristais líquidos, bem como sua definição e algumas de suas principais características e propriedades.

1.1 Uma nova mesofase da matéria

Em 1888, o botânico austríaco Friedrich Reinitzer, trabalhando no Instituto de Fisiologia de Plantas da Universidade de Praga, observou que um material conhecido como benzoato de colesterila, presente nas plantas, possuía dois pontos de fusão distintos[4]. Em seus experimentos Reinitzer primeiramente elevou a temperatura de uma amostra deste material que estava na fase sólida cristalina e observou que a amostra transitou para um líquido turvo, e aumentando mais a temperatura, o material transitou novamente para um líquido transparente. Portanto, em virtude destas observações, Reinitzer é considerado o descobridor de uma nova mesofase da matéria, a mesofase *líquido cristalina*.

Reinitzer, fascinado com a descoberta, comunicou o ocorrido ao físico alemão Otto Lehmann que era especialista em óptica de cristais. Lehmann foi quem nomeou de cristal líquido este novo estado da matéria, ilustrando que era uma fase intermediária entre as fases sólida cristalina e líquido isotrópico, compartilhando importantes propriedades de ambas as fases[5].

Até 1890 todas as substâncias líquido cristalinas investigadas ocorriam naturalmente e foi então que Gatterman e Ritschke sintetizaram o primeiro cristal líquido, o p-azoxyanisole. Hoje em dia são sintetizados uma variedade enorme de cristais líquidos que possuem propriedades bem específicas.

No início do século passado George Friedel, que conduziu vários experimentos em substâncias líquido cristalinas, foi o primeiro a explicar os efeitos de orientação devidos à presença de um campo elétrico, e também a explicar a presença de defeitos em cristais líquidos. Em 1922, Friedel propôs uma classificação para os cristais líquidos baseada nas diferentes formas de ordenamento das moléculas.

Entre 1922 e o início da II Guerra Mundial, Oseen e Zöcher desenvolveram as bases matemáticas para o estudo das mesofases líquido cristalinas. Depois do início da guerra muitos cientistas acreditavam que todas as principais características e propriedades dos cristais líquidos haviam sido descobertas. Somente por volta de 1950, com trabalhos de Brown nos Estados Unidos, de Chrstrakoff na Rússia, de Gray e Frank na Inglaterra, os cristais líquidos voltaram a despertar o interesse dos pesquisadores. Frank e mais tarde Leslie e Ericksen desenvolveram teorias do contínuo para sistemas estáticos e dinâmicos, e em 1968 cientistas da *Radio Corporation of America* (RCA) construíram o primeiro mostrador de cristal líquido[6].

Já na década de 1960, um físico teórico francês, Pierre-Gilles de Gennes, que na época trabalhava com magnetismo e supercondutividade, mudou sua linha de pesquisa para os cristais líquidos e logo encontrou fascinantes analogias entre os cristais líquidos e supercondutores, bem como materiais magnéticos[7]. Estes trabalhos renderam-lhe o prêmio Nobel de física em 1991. O atual desenvolvimento da ciência dos cristais líquidos tem uma profunda influência dos trabalhos de Pierre-Gilles de Gennes.

1.2 Mas, o que é cristal líquido?

O cristal líquido é um estado da matéria onde o grau de ordem molecular é intermediária entre a ordem orientacional e posicional de longo alcance dos sólidos cristalinos, e a desordem de longo alcance dos líquidos isotrópicos[8] (figura 1.1).



Figura 1.1: *Representação esquemática dos estados de algumas substâncias orgânicas.*

A principal característica de um cristal líquido é a anisotropia da forma de seus constituintes (moléculas ou agregados). Tais que suas propriedades ópticas, elétricas e magnéticas, são semelhantes às de um sólido cristalino anisotrópico, e as propriedades mecânicas semelhantes aos líquidos, o que caracteriza sua fluidez. Os cristais líquidos são classificados por mesofases essencialmente por sua simetria e grau de ordenamento.

Os materiais que apresentam a mesofase líquido cristalina são divididas em dois grupos, os cristais líquidos termotrópicos e os liotrópicos, que são caracterizados pelo tipo de suas moléculas[9].

1.2.1 Cristais Líquidos Termotrópicos (CLT)

Os cristais líquidos termotrópicos são constituídos por moléculas orgânicas anisométricas que possuem a forma semelhante a de charutos ou discos que recebem o nome de cristais líquidos calamíticos e discótico, respectivamente (figuras 1.2 e 1.3).

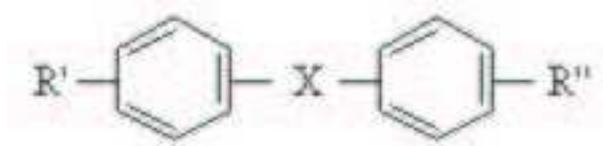


Figura 1.2: Molécula de um típico cristal líquido calamítico.

Sua principal característica, é que as transições de fase neste grupo de cristais líquidos ocorrem principalmente com a variação de temperatura e/ou pressão.

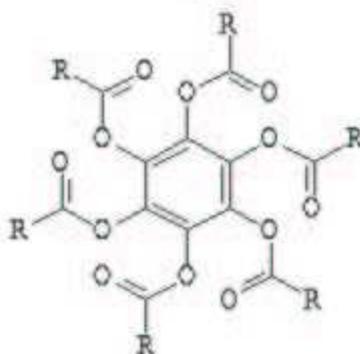


Figura 1.3: Molécula de um típico cristal líquido discótico.

Já a importância dos cristais líquidos termotrópicos não está apenas nos aspectos de pesquisa básica em física e química, mas também nas suas aplicações tecnológicas, como a fabricação de mostradores digitais (*displays*) [10].

1.2.2 Cristais Líquidos Liotrópicos (CLL)

Os cristais líquidos liotrópicos são sistemas químicos compostos pela mistura de dois ou mais constituintes, onde um de seus compostos são moléculas anfifílicas dispersas em um solvente, em geral a água.

Estas moléculas anfifílicas são caracterizadas por possuírem uma parte hidrofílica, ou seja, altamente solúvel em solventes polares, como a água, e a outra parte hidrofóbica, isto é, altamente solúvel a hidrocarbonetos ou solventes não polares. Dizemos, portanto, que a molécula é formada por uma cabeça polar e uma cauda carbônica (figura 1.4).

Nestas misturas liotrópicas, as moléculas anfifílicas acima de uma concentração chamada *concentração molecular crítica*, formam aglomerados de moléculas que recebem o nome de micelas[11]. A figura 1.5 a esquerda, representa o corte transversal de uma micela em um solvente polar e a figura a direita, representa o corte transversal de uma micela reversa, ou seja, uma micela em um solvente apolar. Estas micelas podem também possuir a forma semelhante a de um grão de arroz ou discos. Uma micela com a forma semelhante a de um grão de arroz possui um tamanho típico de 50Å[12] (figura 1.6)

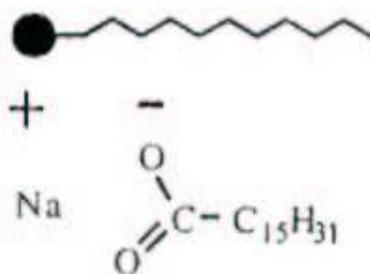


Figura 1.4: *Típica molécula anfifílica*[10].

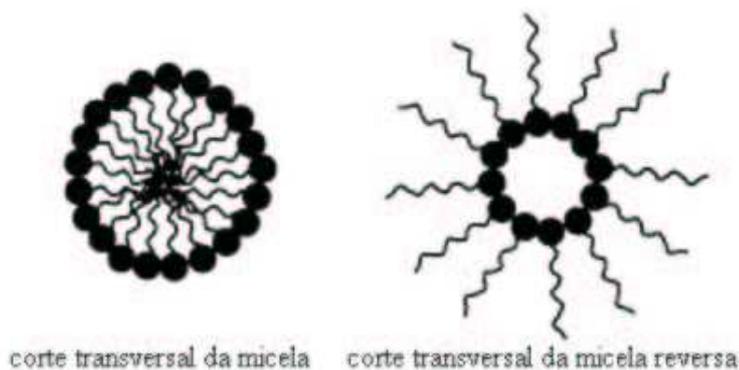


Figura 1.5: *Corte transversal de uma estrutura formada por moléculas anfifílicas (micelas) em um solvente polar e apolar, respectivamente*[10].

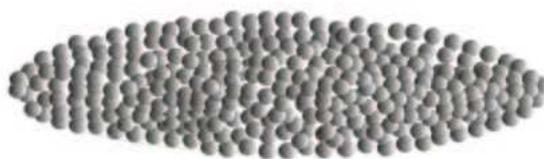


Figura 1.6: *Representação de uma micela com formato de um grão de arroz, formada por moléculas anfifílicas em um solvente polar.*

Nos cristais líquidos liotrópicos as transições de fase ocorrem por variação de temperatura, pressão e concentração relativa dos componentes.

Apesar das diferenças quanto à natureza e ao processo de obtenção dos liotrópicos com relação aos termotrópicos, as teorias que os caracterizam podem ser aplicadas para ambos, considerando apenas as propriedades de simetria macroscópicas que caracterizam as fases[13].

E os cristais líquidos liotrópicos também possuem aplicação tecnológica, como o sensor de vibrações mecânicas[14].

Vejamos agora como podemos definir a ordem orientacional dos cristais líquidos.

1.3 Ordem Orientacional

Uma característica muito importante da mesofase líquido cristalina é a tendência que as moléculas e micelas têm de apontar ao longo de um eixo comum chamado de *diretor*, denotado por um vetor unitário \vec{n} (figura 1.7).

É muito importante notarmos (figura 1.7) que os estados \vec{n} e $-\vec{n}$ são equivalentes, pois as moléculas não apresentam sentido preferencial.

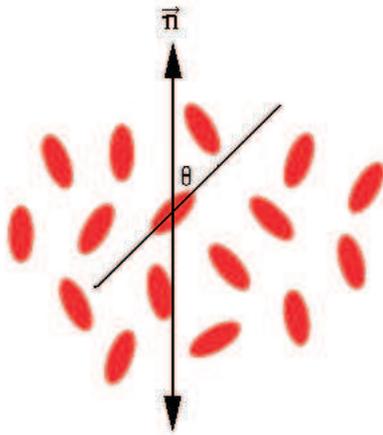


Figura 1.7: *Ordem orientacional em um cristal líquido calamítico*[10].

Podemos definir um parâmetro de ordem para especificar o grau de ordem orientacional em um cristal líquido. Este pode ser feito de muitas maneiras, porém, o mais utilizado é o de calcular o valor médio do segundo polinômio de Legendre, ou seja,

$$S = \langle P_2(\cos \theta) \rangle = \left\langle \frac{3}{2} \cos^2 \theta - \frac{1}{2} \right\rangle, \quad (1.1)$$

onde θ é o ângulo formado entre o diretor e o eixo principal das moléculas (figura 1.7). E os *brackets* representam uma média sobre muitas moléculas ao mesmo tempo ou uma média sobre o tempo para uma única molécula[10].

Definido o vetor diretor que define a ordem orientacional do cristal líquido, podemos agora classificar as mesofases.

1.4 Classificação das mesofases dos cristais líquidos

A classificação das fases dos cristais líquidos é feita de acordo com suas propriedades estruturais e ordem molecular[7]. Os cristais líquidos termotrópicos possuem uma grande variedade de mesofases. As mais conhecidas são:

- esmética,
- nemática,
- colestérica,
- isotrópica,
- colunar.

E os cristais líquidos liotrópicos também apresentam uma grande variedade de mesofases, tais como,

- lamelar (que é o análogo a mesofase esmética dos CLT),
- nemática,
- hexagonal,
- colunar,
- isotrópica.

Porém, apesar de tantas mesofases existentes nos cristais líquidos, discutiremos apenas as mesofases nemática e isotrópica presentes nos cristais líquidos liotrópicos que foram utilizadas para o desenvolvimento deste presente trabalho.

1.4.1 A fase nemática

Do ponto de vista microscópico, nos cristais líquidos a fase nemática possui ordem orientacional de longo alcance, onde as micelas (no caso de cristais líquidos liotrópicos) se orientam, em média, paralelas entre si, sendo a ordem posicional de curto alcance[7]. Esta ordem orientacional apenas é possível devido a forma anisométrica das micelas, ou seja, não possuem simetria esférica.

Uma particularidade dos cristais líquidos liotrópicos é que para uma dada concentração, o sistema pode apresentar fases nemáticas uniaxiais (discótica e calamítica) e biaxiais, variando-se apenas a temperatura. Nos sistemas liotrópicos as transições de fase são acompanhadas por variações simultâneas de ordenamento e da forma dos agregados moleculares (micelas).

A fase nemática biaxial é possível quando o sistema é composto por dois tipos de moléculas anfífilas diferentes (para certas concentrações), que conduzem à formação de agregados moleculares biaxiais (figura 1.8). Na fase biaxial os agregados estão orientados em média ao longo das três direções do espaço a , b e c , isto é, existe uma ordem orientacional tridimensional. Nessa mesofase o sistema apresenta propriedades macroscópicas anisotrópicas semelhantes a de um cristal biaxial.

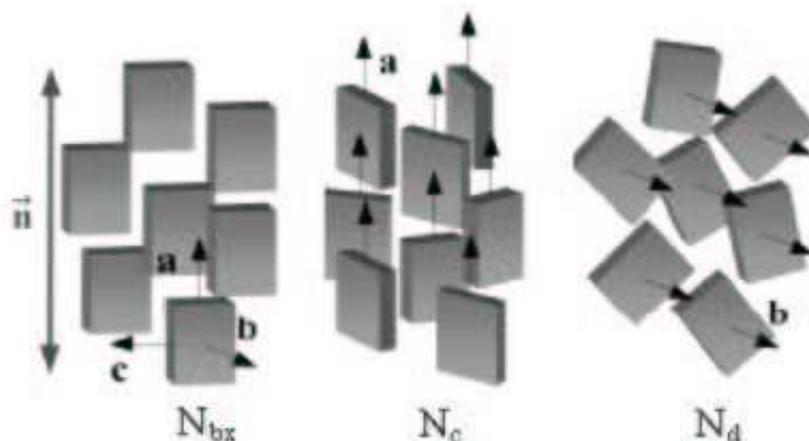


Figura 1.8: Representação esquemática das mesofases nemática biaxial (N_{bx}), nemática uniaxial calamítica (N_c) e nemática uniaxial discótica (N_d). As dimensões típicas dos agregados micelares em uma solução ternária (laurato de potássio/decanol/água) são: $a \sim 70 \text{ \AA}$, $b \sim 28 \text{ \AA}$ e $c \sim 35 \text{ \AA}$ [15].

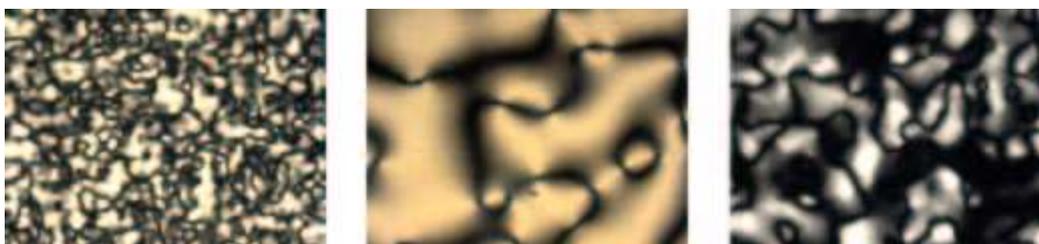


Figura 1.9: Foto de um cristal líquido liotrópico (laurato de potássio/decanol/água) na mesofase nemática biaxial, calamítica e discótica, respectivamente utilizando a técnica microscopia óptica de luz polarizada.

As fases nemáticas uniaxiais da figura 1.8 surgem devido à flutuação de orientação causada pela variação de temperatura. Quando existem flutuações de orientação em torno do eixo a tem-se a fase nemática calamítica (também chamada de cilíndrica). Neste caso há apenas um eixo de simetria paralelo ao eixo a . A outra fase nemática uniaxial resulta de flutuações de orientação em torno do eixo b . Esta mesofase é conhecida como fase nemática discótica, ou simplesmente nemática disco[15].

De acordo com a Eq.(1.1) o parâmetro de ordem orientacional para esta mesofase é $S = 1$.

1.4.2 Fase isotrópica

A fase isotrópica é caracterizada por não possuir nenhuma ordem posicional e/ou orientacional (figura 1.10). Porém, o que a diferencia da fase líquida é o fato de suas micelas (para o caso de cristais líquidos liotrópicos) ou moléculas (para o caso de cristais líquidos termotrópicos) possuírem formas anisométricas. Esta anisometria dos constituintes (aglomerados moleculares/moléculas) de uma substância é a causa da anisotropia das propriedades físicas dos cristais líquidos, tais como, birrefringência, susceptibilidade diamagnética, etc.



Figura 1.10: *Representação esquemática da mesofase isotrópica.*



Figura 1.11: *Foto de uma cristal líquido liotrópico laurato de (potássio/decanol/água) na fase isotrópica utilizando a técnica de microscopia óptica de luz polarizada.*

O parâmetro de ordem orientacional para a fase isotrópica é $S = 0$, ou seja, as micelas não possuem uma direção preferencial.

Na próxima seção abordaremos a teoria elástica do contínuo nos cristais líquidos, que utilizaremos na seção 1.6 para tratar de defeitos topológicos dos mesmos.

1.5 Teoria elástica do contínuo

O alinhamento dos objetos anisotrópicos no cristal líquido é não uniforme, de modo que esses materiais apresentam variações na ordem molecular. Porém, em geral, estas variações

ocorrem para dimensões muito maiores do que as dimensões moleculares e, portanto, a energia de interação molecular é grande quando comparada com energia por molécula envolvida na distorção do nemático. Desse modo, é conveniente utilizar uma teoria contínua, desprezando a estrutura em escala microscópica.

Esta teoria elástica do contínuo será descrita por uma densidade de energia livre que dependerá da variação do diretor, ou seja,

$$\mathcal{F} = \mathcal{F}(n_{i,j}); \quad n_{i,j} = \frac{\partial n_i}{\partial x_j}$$

onde $i, j = 1, 2, 3$ referindo-se aos eixos do sistema de referência.

Para nossa “alegria” esta densidade de energia está condicionada à algumas restrições limitando assim, o número de possíveis termos. Estas restrições são:

1. Não podem haver termos onde \vec{n} e $-\vec{n}$ resultem em diferentes valores de energia.
2. Não podem existir termos não lineares. Pois estes termos mudariam com a rotação do sistema de coordenadas sobre o diretor.
3. Os termos desta energia livre devem obedecer o teorema da divergência, ou seja, os termos podem ser escritos como um divergente para que quando forem integrados sobre o volume da amostra possam ser mudados para uma integral de superfície.

Encontrar todos os termos que satisfaçam estes três critérios é um trabalho extenso que encontra-se no apêndice A. Então a energia livre por volume para um cristal líquido nemático não quiral pode ser escrito como

$$\mathcal{F}_v = \frac{1}{2}K_{11} \left[\vec{\nabla} \cdot \vec{n} \right]^2 + \frac{1}{2}K_{22} \left[\vec{n} \cdot (\vec{\nabla} \times \vec{n}) \right]^2 + \frac{1}{2}K_{33} \left[\vec{n} \times (\vec{\nabla} \times \vec{n}) \right]^2, \quad (1.2)$$

onde K_{11} , K_{22} e K_{33} são constantes análogas às constantes elásticas. Tais que estas três constantes descrevem a dificuldade (ou dureza) de distorcer o diretor em um cristal líquido. As constantes K_{11} , K_{22} e K_{33} representam as distorções do tipo *splay* (divergência ou afunilamento), *twist* (torção) e *bend* (flexão) respectivamente (figura 1.12).

Estas constantes são positivas, têm a dimensão de energia por unidade de comprimento e são dependentes da temperatura. A ordem típica de grandeza destas constantes elásticas é de 10^{-6} *dynas* tanto para os termotrópicos[7] quanto para os liotrópicos[16].

1.5.1 Declinações

Além da variação do vetor diretor, uma típica amostra de cristal líquido contém muitos pontos onde o diretor não está definido. Teoricamente, estes defeitos podem ser pontos ou linhas onde o parâmetro de ordem orientacional muda descontinuamente.

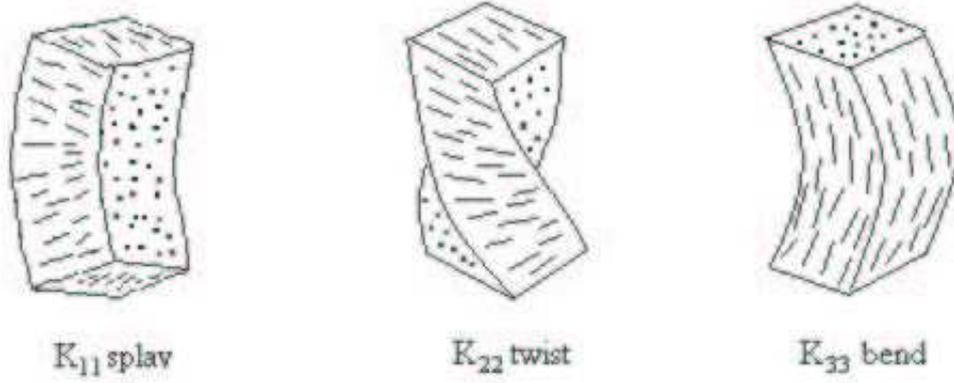


Figura 1.12: *Os três tipos de distorção em um cristal líquido nemático calamítico não quiral*[10].

Defeitos do tipo linha são os mais onipresentes em cristais líquidos, inclusive em nossos experimentos, por isso nossa atenção será dedicada a estes defeitos do tipo linha que também podem ser chamados de declinações.

Para estudar estas declinações vamos nos restringir ao plano que contém os eixos $x - y$ e que a declinação corta este plano na origem (figura 1.13). Em cada ponto deste plano, o diretor tem uma específica orientação, dada pelo ângulo θ , medida no sentido horário a partir do eixo x . Além disso, θ é uma função de x e y , ou seja, $\theta = \theta(x, y)$. Então, da figura 1.13 temos que as componentes do diretor são

$$\begin{aligned} n_x &= \cos[\theta(x, y)]; \\ n_y &= \sin[\theta(x, y)]; \\ n_z &= 0. \end{aligned}$$

O divergente e o rotacional do diretor são

$$\begin{aligned} \vec{\nabla} \cdot \vec{n} &= \cos \theta \left(\frac{\partial \theta}{\partial y} \right)_x - \sin \theta \left(\frac{\partial \theta}{\partial x} \right)_y, \\ (\vec{\nabla} \times \vec{n})_z &= \cos \theta \left(\frac{\partial \theta}{\partial x} \right)_y + \sin \theta \left(\frac{\partial \theta}{\partial y} \right)_x. \end{aligned} \quad (1.3)$$

Para simplificar nosso problema faremos as três constantes elásticas na Eq.(1.2) serem iguais¹ a K . Assim, a energia livre por unidade de volume pode ser reescrita, com o auxílio da Eq.(1.3), como segue

$$\mathcal{F}_v = \frac{1}{2} K \left[\left(\frac{\partial \theta}{\partial x} \right)_y^2 + \left(\frac{\partial \theta}{\partial y} \right)_x^2 \right] = \frac{1}{2} K |\vec{\nabla} \theta|^2. \quad (1.4)$$

¹Esta é conhecida como aproximação de uma única constante e é válida porque as constantes K_{11} , K_{22} e K_{33} possuem a mesma ordem de grandeza.

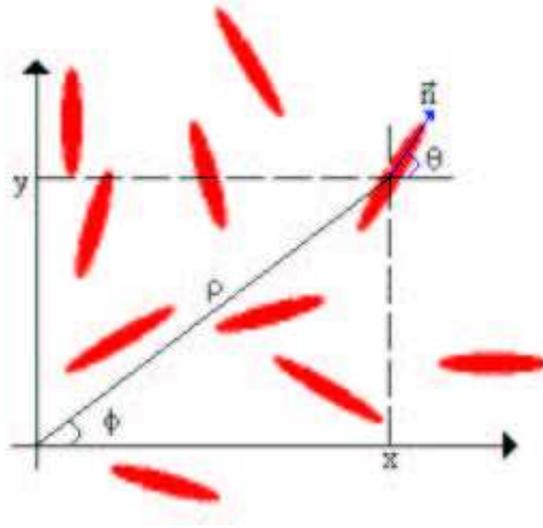


Figura 1.13: *Uso de coordenadas polares para especificar a representação da configuração do diretor de uma declinação que atravessa o plano x-y na origem, em relação a uma micela[10].*

A configuração do diretor ao redor de uma declinação deve possuir uma forma que minimize a energia livre. Um modo de obter esta configuração, ou seja, encontrar uma função $\theta(x, y)$ que minimize \mathcal{F}_v é aplicar a equação de Euler-Lagrange na Eq.(1.4),

$$\frac{\partial F}{\partial \theta} - \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial F}{\partial \theta'_x} \right) - \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{\partial F}{\partial \theta'_y} \right) = 0, \quad (1.5)$$

onde

$$\theta'_x = \frac{\partial \theta}{\partial x} \quad ; \quad \theta'_y = \frac{\partial \theta}{\partial y}.$$

Substituindo (1.4) em (1.5), obtemos

$$\frac{\partial}{\partial \theta} \left\{ \frac{1}{2} K [(\theta'_x)^2 + (\theta'_y)^2] \right\} - \frac{\partial}{\partial x} \left\{ \frac{\partial}{\partial \theta'_x} \left[\frac{1}{2} K (\theta_x'^2 + \theta_y'^2) \right] \right\} - \frac{\partial}{\partial y} \left\{ \frac{\partial}{\partial \theta'_y} \left[\frac{1}{2} K (\theta_x'^2 + \theta_y'^2) \right] \right\} = 0. \quad (1.6)$$

O primeiro termo na Eq.(1.6) é nulo, pois a energia livre por unidade de volume depende apenas das derivadas da função θ . Então, podemos reescrever a Eq.(1.6) da seguinte forma

$$-\frac{K}{2} \left\{ \frac{\partial}{\partial x} \left[\frac{\partial}{\partial \theta'_x} (\theta'_x)^2 \right] + \frac{\partial}{\partial y} \left[\frac{\partial}{\partial \theta'_y} (\theta'_y)^2 \right] \right\} = -K \left\{ \frac{\partial \theta'_x}{\partial x} + \frac{\partial \theta'_y}{\partial y} \right\} = 0. \quad (1.7)$$

Lembrando das definições da Eq.(1.5) podemos reescrever a Eq.(1.7) como segue

$$\frac{\partial^2 \theta}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \theta}{\partial y^2} = \nabla_{xy}^2 \theta = 0, \quad (1.8)$$

que é a equação de Laplace em duas dimensões.

Então devemos agora resolver a Eq.(1.8) para encontrarmos a função $\theta(x, y)$ que nos permite visualizar a configuração do diretor ao redor de uma declinação. Porém, devido a simetria do nosso sistema é conveniente reescrever a Eq.(1.8) em coordenadas polares (ρ, θ) como segue

$$\frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \left(\rho \frac{\partial \theta}{\partial \rho} \right) + \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2 \theta}{\partial \phi^2}, \quad (1.9)$$

onde

$$\begin{aligned} x &= \rho \cos \theta & ; & & y &= \rho \sin \theta \\ \rho &= \sqrt{x^2 + y^2} & ; & & \phi &= \tan^{-1} \left(\frac{y}{x} \right). \end{aligned}$$

Utilizando o método de separação de variáveis encontramos que uma das possíveis soluções para a Eq.(1.9), chamada de declinação axial, depende linearmente de ϕ e não depende de ρ , que é $\theta(\phi) = m\phi + \theta_0$, onde m e θ_0 são constantes.

Uma restrição sobre a função $\theta(\phi)$ é que ela possui um valor único. Pois, como o diretor não tem um sentido preferencial, ou seja, os estados \vec{n} e $-\vec{n}$ são equivalentes. $\theta(\phi)$ deve mudar somente para múltiplos de π quando ϕ é acrescido de 2π . Assim, a constante m deve ser um múltiplo de $\pm 1/2$, dando a forma final da solução como

$$\theta(\phi) = m\phi + \theta_0 ; \quad m = \pm \frac{1}{2}, \pm 1, \pm \frac{3}{2}, \dots \quad (1.10)$$

A constante m é conhecida como comprimento da declinação (*disclination strength*). Na figura 1.14 podemos ver algumas configurações do diretor ao redor da declinação (veja apêndice B).

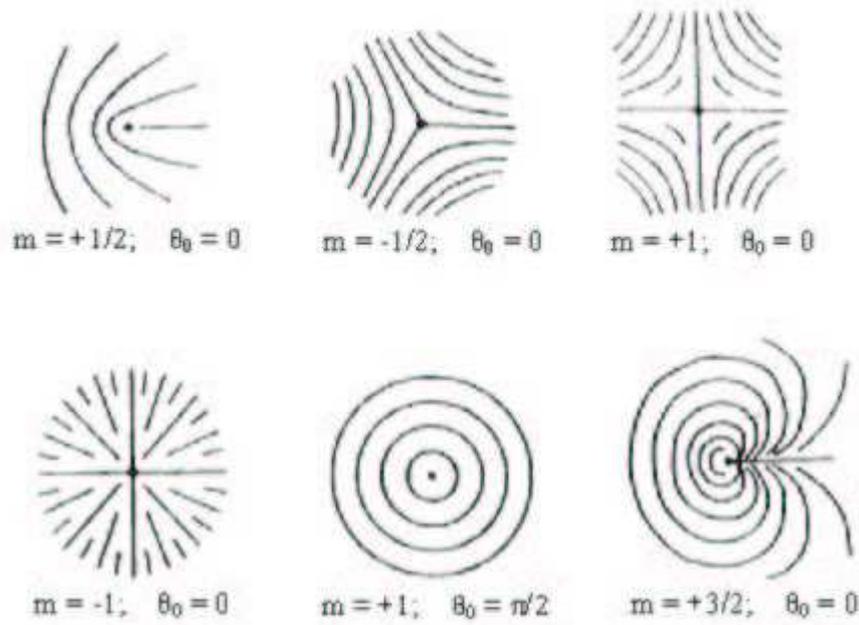


Figura 1.14: Algumas configurações do vetor diretor ao redor de uma declinação axial[10].

A Eq.(1.4) que é a energia livre por unidade de volume, pode ser reescrita em coordenadas polares com o auxílio do conjunto das equações (1.9) assumindo a seguinte forma

$$\mathcal{F}_v = \frac{1}{2}K \left[\left(\frac{\partial\theta}{\partial\rho} \right)_\phi^2 + \frac{1}{\rho^2} \left(\frac{\partial\theta}{\partial\phi} \right)_\rho^2 \right]. \quad (1.11)$$

Substituindo a Eq.(1.10) na Eq.(1.11) obtemos

$$\mathcal{F}_v = \frac{1}{2}K \frac{m^2}{\rho^2} \quad (1.12)$$

que é a energia livre por unidade de volume para uma declinação axial[10].

A Eq.(1.12) nos permite dizer que a energia livre por unidade de volume é proporcional ao quadrado do comprimento da declinação (m) e diverge na declinação ($\rho \rightarrow 0$). Isso significa que a declinação é uma região com ausência de ordem orientacional, isto é, uma linha isotrópica imersa em uma fase nemática. Essa linha isotrópica em um meio nemático recebe o nome de *defeito tipo corda*. No terceiro capítulo descreveremos a técnica experimental de como obter estes defeitos e o procedimento para identificar o comprimento da declinação (m).

Na seção seguinte abordaremos este defeito do tipo corda utilizando a linguagem topológica que será necessária para uma posterior comparação com o defeito tipo corda existente no Universo Primordial.

1.6 Defeito topológico do tipo corda em cristais líquidos

A palavra defeito presente no título acima quer nos passar a idéia de que na mesofase nemática de um cristal líquido podemos encontrar uma linha (corda) isotrópica, ou seja, uma falha (defeito) na estrutura desta mesofase. Já a palavra topológica quer dizer que uma descrição completa e exata deste defeito envolvem idéias de simetria incorporadas na topologia. A idéia de topologia, ou mais precisamente, teoria homotópica, permite associar o caráter de ordenamento de um meio e o tipo de defeito que surge no mesmo, encontrar a lei de decomposição, fusão e o cruzamento de defeitos, delinear seu comportamento durante uma transição de fase, etc...[17, 18]. O ponto chave é ocupado pelo conceito de invariante topológico, também conhecido como uma carga topológica, que é essencial em todos os defeitos.

A estabilidade do defeito é garantida pela conservação de sua carga. A classificação homotópica de defeitos inclui três passos: Primeiro devemos definir o parâmetro de ordem do sistema. Em um estado não uniforme o parâmetro de ordem é uma função das coordenadas. Em segundo lugar devemos determinar o parâmetro de ordem (ou degenerescência) do espaço \mathbb{R} , isto é, a variedade de todos os possíveis valores dos parâmetros de ordem que não alteram os potenciais termodinâmicos do sistema. Num nemático uniaxial, \mathbb{R} é uma esfera denotada por S^2/Z_2 com pares de pontos opostos diametralmente (antipodais) sendo idênticos. Todos

os pontos de S^2/Z_2 representam uma orientação particular do diretor \vec{n} . Visto que $\vec{n} = -\vec{n}$, quaisquer dos pontos opostos diametralmente em S^2/Z_2 descrevem o mesmo estado.

A função $\vec{n}(\vec{r})$ mapeia os pontos do volume nemático dentro de S^2/Z_2 . O mapeamento de interesse são aqueles de “esferas” i -dimensionais (também conhecida como “ i -esfera”) cercado os defeitos. Um defeito do tipo linha é cercado por um círculo, $i = 1$.

Em terceiro lugar, devemos definir o grupo homotópico $\pi_i(\mathbb{R})$. Os elementos deste grupo são os mapeamentos das esferas i -dimensionais cercado o defeito em um espaço real dentro do parâmetro de ordem espacial. Para classificar a dimensionalidade t' de um defeito em um meio t' -dimensional temos que conhecer o grupo homotópico $\pi_i(\mathbb{R})$ com $i = t - t' - 1$. Por outro lado, cada elemento de $\pi_i(\mathbb{R})$ corresponde a uma classe de defeitos topologicamente estáveis, todos esses defeitos são equivalentes uns aos outros sob contínuas deformações. Por outro lado, os elementos do grupo homotópico são cargas topológicas dos defeitos. O estado de defeito livre corresponde a um elemento unitário do grupo homotópico e carga topológica zero.

Como exemplo, consideremos uma declinação na figura 1.15 (o primeiro defeito a esquerda) e vamos verificar sua estabilidade topológica. Vamos cercar o defeito linha com um círculo γ que está a uma distância de algumas micelas do defeito, para que \vec{n} seja bem definido em todos os pontos ao longo de γ . A função $\vec{n}(\vec{r})$ define γ dentro de algum contorno fechado Γ sobre S^2/Z_2 . Γ deve ser de dois tipos:

- (i) deve começar e terminar no mesmo ponto (por exemplo um círculo).
- (ii) deve conectar dois pontos opostos diametralmente de S^2/Z_2 .

Contornos:

- (i) pode ser continuamente contrátil dentro de um único ponto. O campo diretor correspondente torna-se uniforme, $\vec{n} = \text{constante}$.
- (ii) não pode ser contrátil: seus fins permanecem como os finais de um diâmetro de S^2/Z_2 . Tal contorno estável pode ser visto na figura 1.15. O defeito linha correspondente é topologicamente estável.

O grupo homotópico $\pi_1(S^2/Z_2) = Z_2 = 0, 1/2$ é composto de dois elementos com as seguintes regras de adição: $1/2+1/2 = 0$ e $1/2+0 = 1/2$ descrevendo a interação das declinações. Embora as declinações mostradas à esquerda e à direita da figura 1.15 possuam diferentes intensidades $m = 1/2$ e $m = -1/2$, a diferença entre eles está na energia e não na topologia[19].

No próximo capítulo apresentaremos os defeitos topológicos do ponto de vista do Universo Primordial.

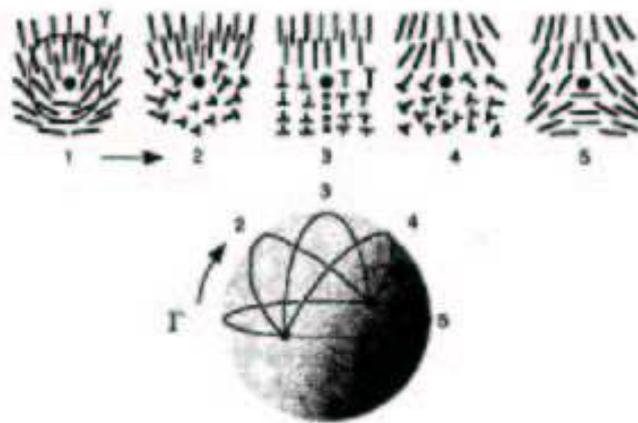


Figura 1.15: Declinações estáveis em um nemático uniaxial e os contornos correspondentes no parâmetro de ordem espacial. Na figura acima as linhas representam micelas paralelas ao plano da folha. Os pontos representam micelas perpendiculares ao plano da folha e os “pregos” representam micelas inclinadas com relação ao plano da folha[19].

Capítulo 2

Defeitos Topológicos no Universo Primordial

A teoria do *Big-Bang* para o universo está muito bem estabelecida até agora, sendo que as observações estão em boa concordância com as previsões do modelo. Medidas apuradas da radiação cósmica de fundo em microondas (CMBR) tem feito da cosmologia uma ciência de precisão, onde modelos para o Universo Primordial são postos a rigorosos testes.

Um destes modelos utilizado para explicar a formação de estruturas no universo, tais como galáxias e aglomerados de galáxias, é o que envolve o conceito de *defeitos topológicos*, em particular o defeito corda cósmica[20, 21], que é o assunto deste capítulo.

2.1 Uma descrição qualitativa dos defeitos topológicos

Um instante após o *Big-Bang*, $t \sim 10^{-43}$ segundos, o universo apresentava uma temperatura de 10^{32} Kelvins e uma “modesta” densidade de $\rho \sim 10^{93}$ gramas por centímetro cúbico. Atualmente, isto é, 15 bilhões de anos após o *Big-Bang* a temperatura do universo é de apenas 3 Kelvins e sua densidade é de $\rho \sim 10^{-29}$ gramas por centímetro cúbico.

Alguns modelos de física de partículas predizem que neste intervalo de tempo o universo sofreu uma infinidade de transições de fase com quebra espontânea de simetria devido ao resfriamento do universo.

Em um sistema com quebra espontânea de simetria há muitas configurações mínimas de energia. Este conjunto de configurações de energia mínima recebe o nome de variedade de vácuo, que é representado pela letra \mathcal{M} . E é a topologia de \mathcal{M} , ou melhor, é o grupo homotópico de \mathcal{M} que determina a existência do defeito[3].

Estas transições de fase com quebra espontânea de simetria podem gerar uma grande quantidade de defeitos topológicos, tais como:

1. *Domínio de parede* - Este defeito é uma superfície fechada (como uma esfera) ou infinita, constituída de uma fase imersa em um meio de fase diferente.



Figura 2.1: *Representação esquemática de um defeito domínio de parede.*

2. *Corda Cósmica* - É semelhante a um fino tubo, podendo ser infinito ou voltas fechadas, constituído de uma fase imersa em outra fase.



Figura 2.2: *Representação esquemática de um defeito corda cósmica.*

3. *Defeito Ponto (Monopólos)* - Defeitos pontos ou monopólos são regiões semelhantes a minúsculos pontos constituídos de uma fase imersa em outra fase.

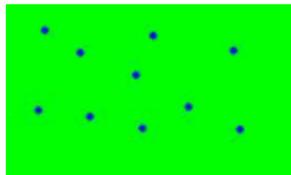


Figura 2.3: *Representação esquemática do defeito monopólo.*

A seguir vamos utilizar o que conhecemos como *Modelo Lagrangiano* para descrever o surgimento destes defeitos topológicos na cosmologia.

2.2 Uma descrição quantitativa dos defeitos topológicos

Para esta descrição, consideremos o modelo lagrangiano global¹

$$\mathcal{L} = \frac{1}{2} \sum_b^N \partial_\mu \phi_b \partial^\mu \phi_b^* - V(\phi)$$

$$V(\phi) = \frac{\lambda}{4} (\phi^* \phi - \eta^2)^2 ; \quad \phi^* \phi = \sum_b^N \phi_b^2 , \quad (2.1)$$

¹O termo global se refere que não utilizaremos versões locais de *gauge*, comuns em física de partículas.

onde ϕ é um campo escalar com N componentes ($1 \leq b \leq N$). Como a densidade de lagrangiana (\mathcal{L}) tem unidade de energia, o campo escalar ϕ_b e a constante η tem unidade de energia e a constante λ é adimensional. A expressão para a energia potencial foi escrita desta forma para que o quadrado da soma do campo escalar tenda para o valor da nossa constante η , isto é,

$$\sum_b^N \phi_b^2 \rightarrow \eta^2$$

produzindo assim um mínimo. E esta condição para o estado fundamental pode ser satisfeita para mais de um valor de ϕ_b . É importante chamar a atenção que o conjunto dos ϕ_b que produzem um mínimo é nossa variedade de vácuo (\mathcal{M}).

A seguir veremos que o valor de N é quem determina o tipo de defeito.

2.2.1 Domínios de Parede

Considerando que o campo ϕ seja um campo escalar de uma componente, ou seja, $N = 1$, o valor de mínima energia será

$$\phi = \pm\eta.$$

Desta forma o campo deve assumir o valor $+\eta$ para uma parte do espaço e $-\eta$ para outra (figura 2.4). Estas regiões devem ser separadas, por fronteiras bidimensionais ou paredes, devido a transição de $\phi = +\eta$ para $\phi = -\eta$ e vice versa[20, 22].

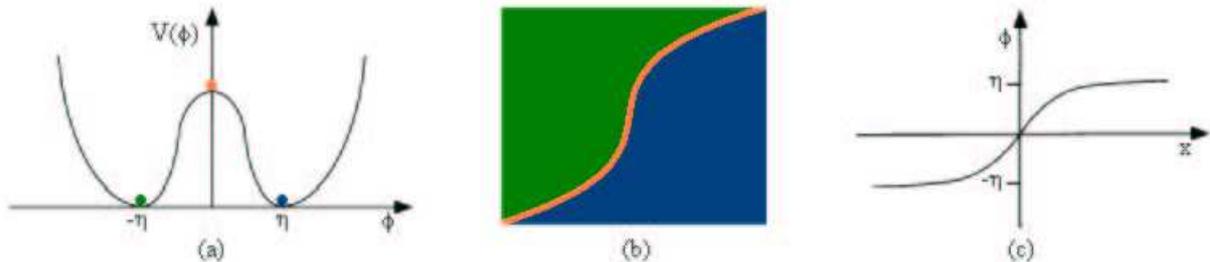


Figura 2.4: (a) Representação do potencial da Eq.(2.1) com um campo escalar real de uma única componente. (b) Duas configurações de energia mínima separadas por uma parede. (c) Potencial escalar (ϕ) vs. posição (x).

Para uma melhor compreensão considere o exemplo a seguir:

No modelo de *Ising*, sabemos que os *spins* podem ser apenas *up* ou *down*. Se uma região de *spin up* estiver ao lado de uma região de *spin down*, então entre estas duas regiões deve haver uma “parede” de alta energia, por isso o termo domínio de parede (figura 2.5).

A figura 2.6 representa uma cadeia de paredes de domínio formada em uma simulação numérica de uma transição de fase onde uma simetria Z_2 é espontaneamente quebrada[23].

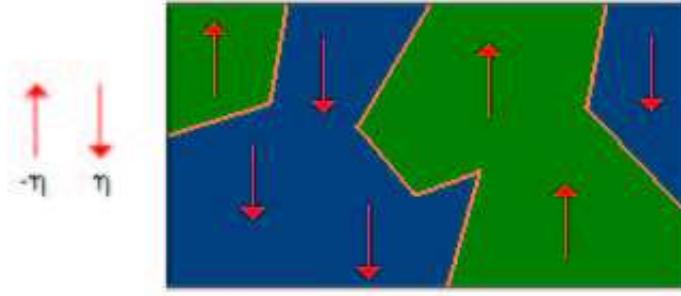


Figura 2.5: *Domínios em um sistema ferromagnético.*

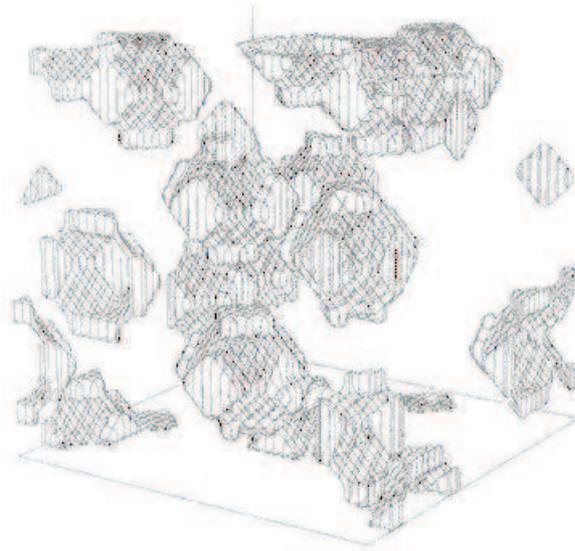


Figura 2.6: *Simulação numérica de domínios de parede[24].*

2.2.2 Cordas Cósmicas

As cordas cósmicas são muito mais interessantes para o cenário cosmológico do que o defeito de domínios de parede, pois a existência destes podem produzir desastrosas conseqüências cosmológicas, como a produção de uma grande flutuação na temperatura da CMBR. Diferentemente das cordas que, como veremos, produzem efeitos gravitacionais interessantes.

O defeito corda cósmica surge quando o campo escalar da Eq.(2.1) for um campo escalar complexo de duas componentes, ou seja,

$$V = \frac{\lambda}{4} (\phi^* \phi - \eta^2)^2.$$

Este potencial está ilustrado na figura 2.7. A energia mínima para este potencial é um círculo, parametrizado por um ângulo α , dado por

$$\phi = \frac{1}{\sqrt{2}}\eta e^{i\alpha}. \quad (2.2)$$

A teoria é simétrica para a transformação de fase $\phi \rightarrow \phi e^{i\alpha}$, diferente do defeito de parede, onde a teoria é simétrica para uma transformação de fase $\phi \rightarrow -\phi$.

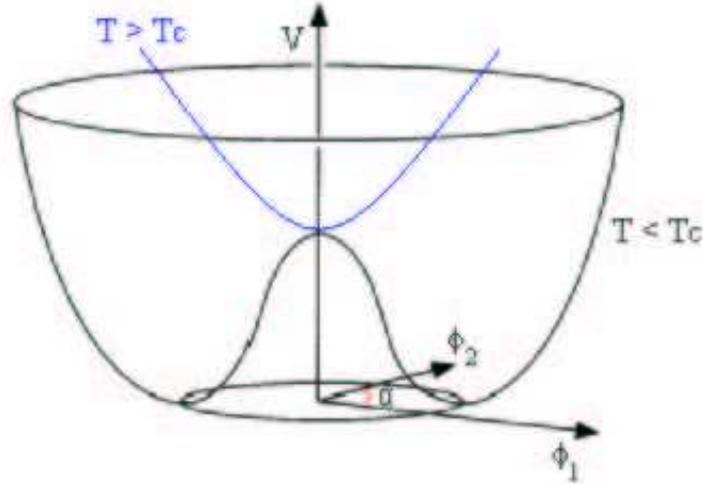


Figura 2.7: Potencial do tipo “chapéu mexicano”.

A transição de fase ocorre para temperatura $T_c \sim \eta$, onde T_c é a temperatura crítica, na qual abaixo dela ocorre a transição de fase. Então para altas temperaturas, nós temos que o valor de ϕ que minimiza a energia é zero, ou seja, $\langle \phi \rangle = 0$. Mas, para temperaturas abaixo de T_c o campo escalar adquire um valor médio diferente de zero. $\langle \phi \rangle$ será o ponto aleatório sobre um círculo de mínima energia[25].

Uma corda cósmica que tenha se formado 10^{-35} segundos após o *Big-Bang*, quando a força forte se separou da eletrofraca, possui hoje um diâmetro não maior do que 10^{-30} centímetros e uma massa que alcança valores da ordem de 10^{16} toneladas por centímetro. Só para se ter uma idéia, 10 Km desta corda possui a massa do Sol.

Devido a esta grande quantidade de massa, as cordas cósmicas apresentam alguns efeitos gravitacionais interessantes, tais como[24]:

- As cordas cósmicas deixaram para trás um fundo de ondas gravitacionais;
- As poucas cordas que existem até hoje, podem ter provocado flutuações na temperatura CMBR;
- As cordas presentes hoje, também podem agir como lentes gravitacionais;
- *loops* de cordas, podem possivelmente servir como sementes para a formação da estruturas no Universo Primordial e

- A natureza cônica do espaço ao redor de uma corda cósmica infinita e reta conduz a duplicação de imagens distantes da fonte (figura 2.8).

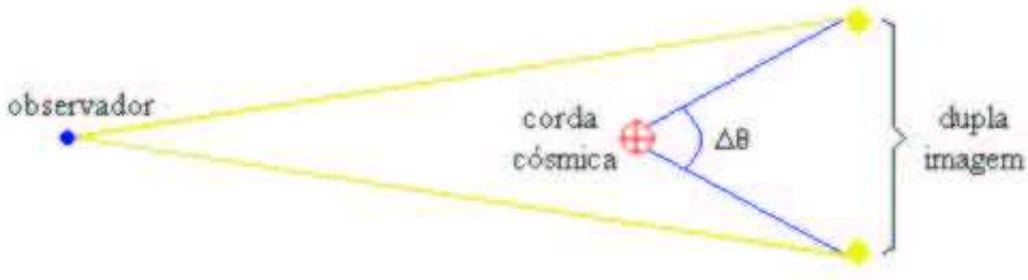


Figura 2.8: Uma corda cósmica produzindo um efeito de dupla imagem.

Vilenkin[26] resolvendo as equações de Campo de Einstein, para uma métrica fora de uma corda infinita e reta no limite em que $G\mu \ll 1$ ², mostrou a natureza cônica do espaço ao redor desta corda.

Em termos de coordenadas cilíndricas (r, θ, z) a métrica é

$$ds^2 = dt^2 - dz^2 - dr^2 - (1 - 4G\mu)^2 r^2 d\theta^2.$$

Por uma transformação do ângulo polar, $\theta \rightarrow (1 - 4G\mu)^2 \theta$, a métrica torna-se a métrica do espaço plano de Minkowski. Entretanto o ângulo θ varia somente para $0 \leq \theta \leq 2\pi(1 - 4G\mu)$ ao invés de $0 \leq \theta \leq 2\pi$. Esta diferença é referida como singularidade cônica, ou seja, o espaço é chamado de cônico, porque em uma hipersuperfície bidimensional o plano normal a corda possui a forma de um cone (figura 2.9).

Na vida, para tudo que fazemos, temos que pagar um preço. E o preço pago por escrevermos a métrica de uma corda cósmica na forma da métrica de Minkowski é uma deficiência angular de $\Delta\theta = 8\pi G\mu$. É interessante ressaltar que esta deficiência angular depende exclusivamente de $G\mu$. Para o caso de uma corda produzida no Universo Primordial $G\mu < 10^{-5}$ [26].

A figura 2.10 representa uma simulação numérica de uma cadeia de cordas cósmicas formadas quando uma simetria $U(1)$ é espontaneamente quebrada. Nesta simulação temos cordas infinitas (isto é, que atravessam a caixa) e voltas (*loops*) de corda[27].

Topologicamente falando agora, o Universo Primordial pode ter sofrido uma transição de fase onde ocorreu a seguinte quebra de simetria (figura 2.11)

$$SO(3) \rightarrow O(2).$$

E a variedade de vácuo correspondente a esta quebra de simetria é

$$\mathcal{M} = S^2/Z_2,$$

²G é a constante gravitacional universal e μ é a densidade linear da corda.

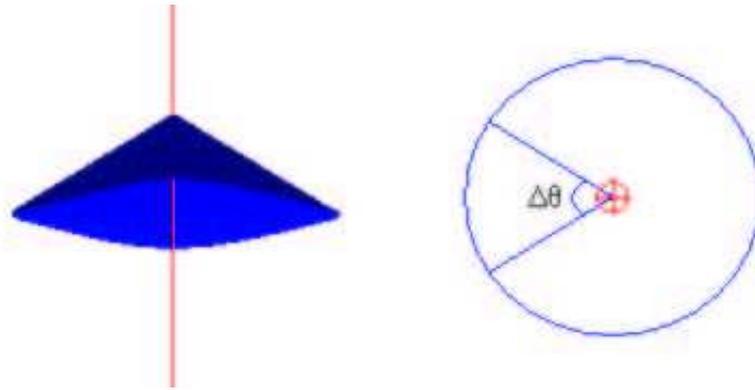


Figura 2.9: *Estrutura cônica do espaço ao redor de uma corda.*

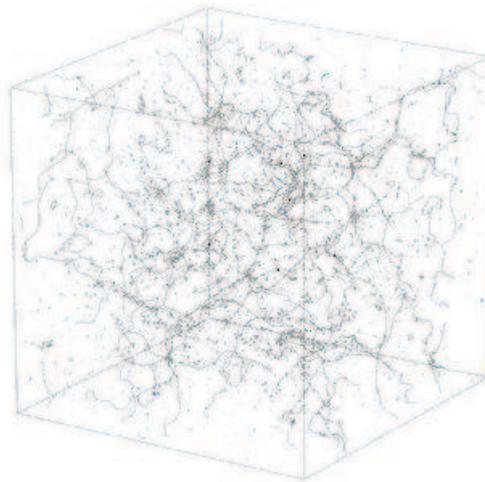


Figura 2.10: *Simulação de uma cadeia de cordas após uma transição de fase*[24].

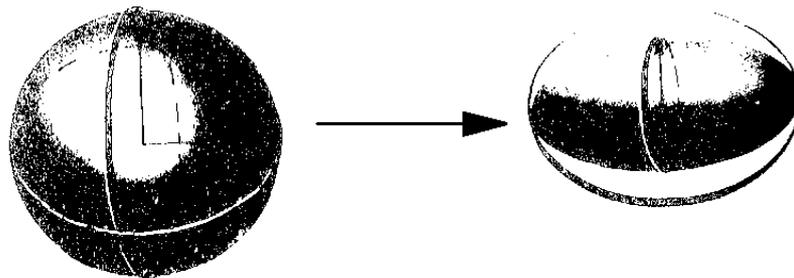


Figura 2.11: *Representação esquemática da quebra de simetria* $SO(3) \rightarrow O(2)$ [28].

o grupo homotópico correspondente ao defeito topológico corda cósmica é o

$$\pi_1(S^2/Z_2) = Z_2$$

que fornece o número de voltas não contráteis³ distintas topologicamente que há sobre a varie-

³Contrátil no sentido que não pode ser reduzido a um ponto.

dade de vácuo (\mathcal{M}), ou seja, este grupo homotópico permite dizer que há cordas cósmicas Z_2 .

É interessante notar que o parâmetro de ordem espacial (S^2/Z_2) para a corda cósmica é o mesmo parâmetro de ordem para espacial para as declinações em cristais líquidos.

2.2.3 Monopólos

O defeito monopólo surge devido o campo escalar da Eq.(2.1) ser um campo escalar real de três componentes

$$V = \frac{\lambda}{4} (\phi^2 - \eta^2)^2 ; \quad \phi^2 = \sum_{b=1}^3 \phi_b^2.$$

Agora nós temos uma teoria, onde a configuração de mínima energia, não são mais pontos distintos ou pontos sobre um círculo, mas são pontos sobre uma 2-esfera. Para um estudo mais detalhado ver Ref.[20, 24].

2.3 O Mecanismo de Kibble

Um dos primeiro a investigar detalhadamente a formação de defeitos topológicos no Universo Primordial durante uma transição de fase com quebra espontânea de simetria foi Kibble[1]. E o processo de formação de defeitos topológicos no Universo Primordial é conhecido como *Mecanismo de Kibble*.

Este mecanismo prevê que após uma transição de fase ocorre a formação de domínios e os defeitos topológicos surgem com a junção destes domínios. Um detalhe importante a frisar é que este mecanismo é válido somente para transições de fase de primeira ordem. O mecanismo que descreve a formação de defeitos topológicos em uma transição de fase de segunda ordem é um outro, conhecido como *Mecanismo de Kibble-Zurek*[29].

Para uma melhor compreensão do Mecanismo de Kibble, vamos considerar o caso onde temos um parâmetro de ordem escalar complexo, com uma quebra espontânea de simetria⁴ $SO(3) \rightarrow O(2)$ (que é o caso anterior, o de uma corda cósmica global). A variedade de vácuo para este caso, como vimos era $\mathcal{M} = S^2/Z_2$ [30]. Como já foi mencionado, o defeito corda irá ocorrer com a junção dos domínios formados por esta transição de fase. Estes domínios surgiram pelo fato que durante a transição de fase, a fase α do campo escalar complexo ϕ (Eq.(2.2)) podem somente ser correlacionadas dentro de uma região finita. α pode ser tomada para ser aproximadamente uniforme dentro de um domínio de tamanho ξ , enquanto varia

⁴ $SO(3)$ é um grupo de rotações em três dimensões. Qualquer rotação pode ser especificada por um vetor que aponta ao longo do eixo de rotação, com um comprimento igual à quantia de rotação e a simetria $O(2)$ representa uma rotação no plano. O apêndice C traz um resumo sobre os principais grupos de simetria.

aleatoriamente de um domínio para outro. Eventualmente estes domínios crescem e se juntam. E os defeitos surgem justamente nesta junção para separar domínios que possuem diferentes valores de α [3] (figura 2.12).

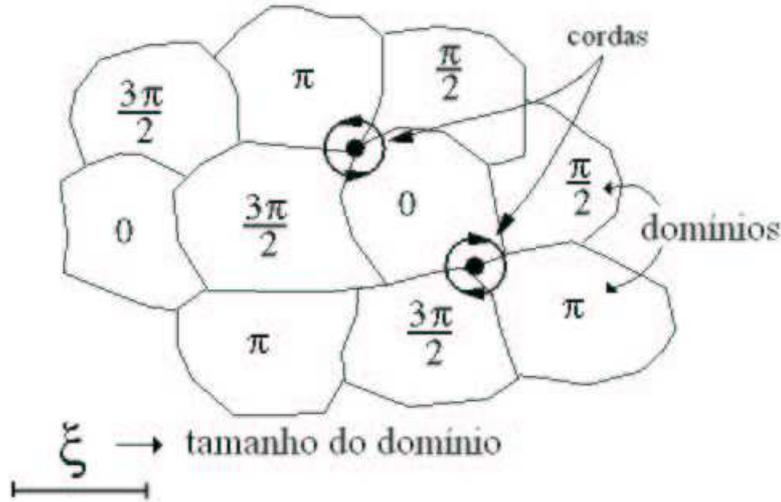


Figura 2.12: *Junção de quatro domínios formando o defeito tipo corda cósmica.*

O tamanho do domínio ξ , é conhecido como *comprimento de correlação* e está associado com a máxima distância sobre a qual o campo ϕ pode ser correlato. Este comprimento de correlação depende de detalhes da transição de fase e da temperatura[24].

O mecanismo de Kibble também prevê que a distribuição de defeitos e antidefeitos formados pela junção de domínios no Universo Primordial obedece uma distribuição gaussiana, cuja a variância é regida pela seguinte relação

$$\sigma = \mathbb{C} N^\nu, \quad (2.3)$$

onde N é o número total de defeitos presentes em uma região Ω de área A . O valor previsto pelo mecanismo de Kibble para ν é $1/4$. A validade deste valor é de natureza universal, isto é, não descreve apenas a correlação entre defeitos e antidefeitos no Universo Primordial, mas também descreve a correlação entre defeitos e antidefeitos em outros sistemas que possuam o mesmo parâmetro de ordem espacial e espaço dimensional.

O valor da constante \mathbb{C} na Eq.(2.3) é definida de acordo com a junção dos domínios elementares. Para a formação de um defeito devido a junção de quatro domínios elementares, formando uma rede quadrada e obtendo $\mathbb{C} = 0,71$ [31], onde o defeito formado será de intensidade $m = \pm 1$ (figura 2.13)

Agora passaremos por uma breve revisão do mecanismo de Kibble em sistemas de matéria condensada.

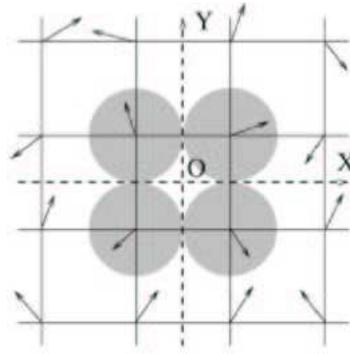


Figura 2.13: Formação de defeitos devido a junção de quatro domínios elementares, formando uma rede quadrada. As setas representam as direções aleatórias do parâmetro de ordem da cada domínio[21].

2.4 Mecanismo de Kibble e o Hélio Superfluido

O primeiro a utilizar o mecanismo de Kibble para descrever a formação de defeitos topológicos em sistemas de matéria condensada foi Wojciech Hubert Zurek. Que em 1985 publicou um artigo na Nature[2], onde discutiu a analogia entre as cordas cósmicas e as linhas de vórtices formadas no hélio superfluido.

No experimento proposto por Zurek - queda de temperatura induzindo uma transição de fase do ^4He normal para superfluido - quando descrito utilizando o mecanismo de Kibble prevê:

1. formação de linhas de vórtices no volume (*bulk*) do hélio superfluido e
2. medida da velocidade aleatória de circulação do superfluido ao redor do vórtice.

E estes vórtices foram observados bem como a velocidades de circulação foram medidas. Zurek diante destes resultados concluiu que seu experimento pode ser utilizado como laboratório para testar o mecanismo de Kibble.

2.5 Mecanismo de Kibble e os Cristais Líquidos Termotrópicos

Isaac Chuang e et al.[3] foram os pioneiros a utilizarem os sistemas líquidos cristalinos para o estudo de formação de defeitos topológicos no Universo Primordial. Eles analisaram a dinâmica de evolução de defeitos topológicos em cristais líquidos termotrópicos, mais especificamente o 4-cyano-4'n-pentylbiphenyl, também conhecido como K15 ou 5CB. Neste cristal líquido eles observaram a presença de defeitos do tipo corda, monopólos e textura. Onde este último defeito mostrou ter uma dinâmica instável, em que pode decair em um par de monopólo-antimonopólo.

Em 1994, Mark Bowick e et al.[32] observaram a produção de declinações (cordas) em uma amostra de K15 por meio do mecanismo de Kibble de formação de domínios em uma transição de fase isotrópica-nemática. O número esperado de cordas formadas por domínio nesta transição é 0,6. Este valor está em boa concordância com a simulação numérica do experimento em que o mecanismo de Kibble é usado para o parâmetro de ordem espacial do nemático uniaxial.

Sanatan Digal e et al.[31] em 1999 observaram a correlação entre a produção de defeitos e antidefeitos no cristal líquido termotrópico K15. Eles mediram a variância da distribuição de defeitos e antidefeitos e determinaram o expoente caracterizando a correlação entre defeitos e antidefeitos para ser $0,26 \pm 0,11$, que condiz com valor de $1/4$ previsto pelo mecanismo de Kibble.

Rajarshi Ray e Ajit Mohan Srivastava[21] em 2004 mostraram utilizando o mecanismo de Kibble em uma amostra do cristal líquido termotrópico K15, que a função densidade de correlação de defeitos e antidefeitos em um dado sistema deve ser completamente determinada em termos do comprimento de correlação ξ , que é proporcional a média da separação inter-defeito r_{av} . E que, quando comprimentos são expressos em unidades de r_{av} , esta distribuição deverá apresentar um comportamento universal.

Um outro ponto interessante de aplicação do estudo de cosmologia em sistemas de matéria condensada podem ser vistas via simulação computacional, como é o caso do trabalho realizado por Caio Sátiro e Fernando Moraes[33], onde mostraram que a luz viajando em cristal líquido nemático com uma declinação sente uma geometria Riemanniana efetiva que é idêntica a de uma seção transversal do espaço-tempo de uma corda cósmica.

No capítulo 4 veremos que o Mecanismo de Kibble também serve para descrever a formação de defeitos topológicos do tipo corda nos cristais líquidos liotrópicos.

Capítulo 3

Diagrama de Fases e Técnica Experimental

Neste capítulo apresentaremos o diagrama de fases da nossa amostra de cristal líquido liotrópico e a técnica experimental utilizada.

3.1 Diagrama de fases

A nossa amostra de cristal líquido liotrópico é uma mistura ternária de laurato de potássio (KL), decanol (DeOH) e água pesada (D_2O).

Através do diagrama de fases desta mistura ternária, que pode ser vista na figura 3.1, podemos observar que variando a temperatura e/ou a concentração relativa do laurato de potássio podemos obter diferentes fases.

Em nossas medidas mantivemos a concentração fixa e variamos apenas a temperatura. A nossa amostra é constituída das seguintes concentrações em porcentagem em massa:

$$\begin{aligned}[\text{KL}] &= 25,30 \% \text{ wt}; \\ [\text{DeOH}] &= 6,24 \% \text{ wt}; \\ [\text{D}_2\text{O}] &= 68,46 \% \text{ wt};\end{aligned}$$

Escolhemos esta concentração por apresentar diferentes tipos de fases presente nesta mistura ternária (linha vermelha na figura 3.1).

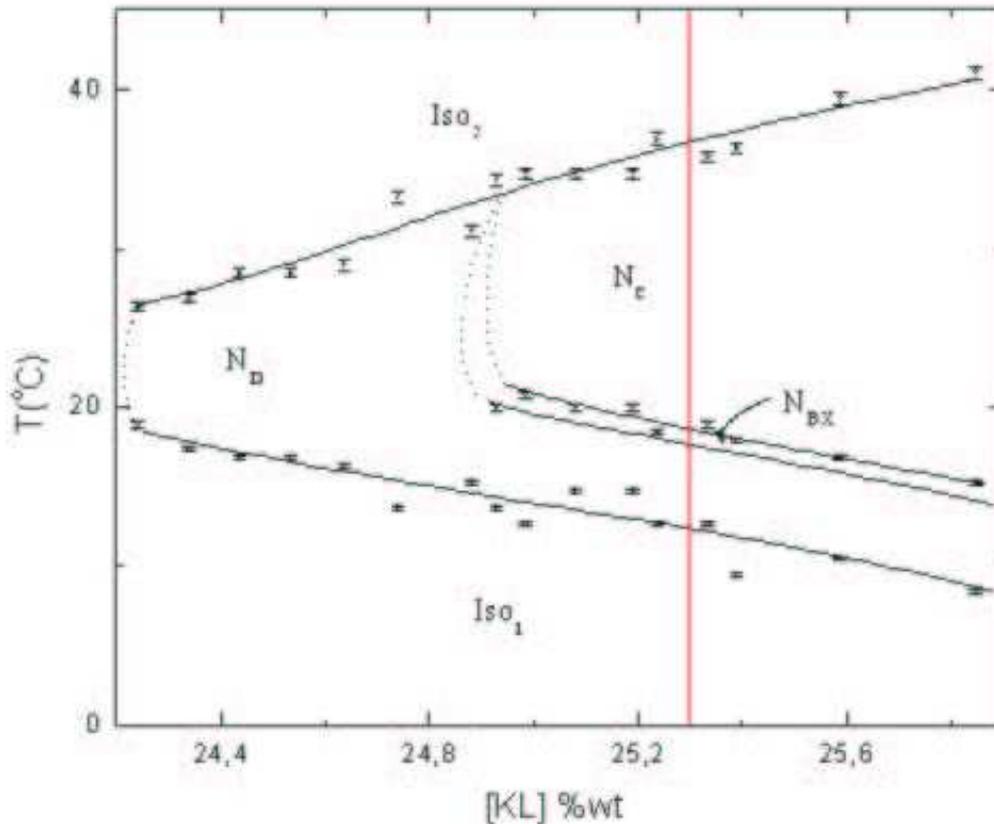


Figura 3.1: Diagrama de fases da mistura ternária, laurato de potássio, decanol e água pesada. A concentração de decanol é fixa com o valor de 6,24 % wt (porcentagem em massa). A concentração de laurato de potássio também está em porcentagem em massa. A linha vermelha representa a concentração da nossa amostra.

3.2 Microscopia óptica de luz polarizada (MOLP)

A técnica experimental utilizada para a produção e observação do defeito tipo corda na nossa amostra de cristal líquido foi a microscopia óptica de luz polarizada. Esta montagem consiste de um microscópio óptico de luz polarizada (Leica), um *hotstage*¹ acoplado na platina giratória do microscópio e uma câmera de captura digital (CCD - Leica) conectada a um computador para aquisição de dados. O *hotstage* (INTEC modelo HS1 - i) possui precisão de 10^{-3} °C. Na figura 3.2 apresentamos uma foto da nossa montagem experimental.

Nesta técnica (MOLP) a luz é polarizada embaixo da platina do microscópio por um polarizador. E passa então através da nossa amostra de cristal líquido liotrópico. Um segundo polarizador, chamado analisador, está localizado perto da ocular dentro do tubo do microscópio.

¹Consiste em um sistema de aquecimento através de uma resistência elétrica controlada por um computador (*hotstage*).



Figura 3.2: *Nossa montagem experimental.*

Quando a posição do polarizador e do analisador é ajustada, de modo que os feixes luminosos tenham um trajeto paralelo, uma imagem normal pode ser vista através da ocular. Porém, se o polarizador é rodado de modo que o seu eixo de polarização fique perpendicular com o analisador, nenhuma luz alcança a ocular e nada pode ser visto.

Se for colocado um objeto birrefringente na platina, uma imagem luminosa aparecerá em fundo escuro. E as micelas de um cristal líquido liotrópico (ou moléculas no cristal líquido termotrópico) são matérias que apresentam birrefringência, isto é, possuem a capacidade de mudar o plano de polarização da luz devido a sua forma anisométrica. Tal que uma amostra de cristal líquido (liotrópico ou termotrópicos) colocada entre dois polarizadores cruzados, pode mudar o plano de polarização da luz assim permitindo que a luz seja transmitida pelos dois polarizadores (figura 3.3), assim observando a textura.



Figura 3.3: *Esquema de uma amostra de cristal líquido entre dois polarizadores mudando o plano de polarização da luz.*

Porém, essa mudança no plano de polarização da luz não ocorre para micelas que se encontram paralelas a um dos planos de polarização dos polarizadores, ou ortogonais aos dois polarizadores.

3.3 Produção dos defeitos

Preenchemos um capilar, de $200\mu\text{m}$ de espessura e 5cm de comprimento com a nossa amostra de cristal líquido liotrópico. E em seguida, vedamos as extremidades do capilar com fita de parafilme e uma camada de esmalte de unha sobre o parafilme. Esta camada de esmalte foi importante para obtermos um isolamento térmico para o parafilme, evitando sua fusão a temperaturas altas ($\sim 50^\circ\text{C}$).

Depois de certificar que o esmalte estava totalmente seco, aplicamos um pouco de pasta térmica perto das extremidades do capilar (antes de chegar no parafilme) (figura 3.4).



Figura 3.4: Capilar de $200\mu\text{m}$ de espessura contendo nossa amostra de cristal líquido liotrópico. A vedação deste capilar foi feito com parafilme e uma camada de esmalte.

Em seguida colocamos o capilar dentro do *hotstage* e fizemos este atingir a temperatura de 50°C durante dez minutos.

Nesta temperatura nossa amostra, de acordo com o diagrama de fases, estava na fase isotrópica, ou seja, não apresenta nenhuma ordem molecular.

Após esse período de dez minutos desligamos o *hotstage* e deixamos nossa amostra entrar em equilíbrio térmico com a sala, cuja a temperatura era de aproximadamente 25°C .

Os defeitos demoravam em torno de vinte horas para se formarem após o desligamento do *hotstage*. Então após vinte horas, nós religamos o *hotstage* e fizemos ele atingir a temperatura de 30°C . Nesta temperatura pelo diagrama de fases, a nossa amostra se encontra na fase nemática calamítica.

Com a temperatura estabilizada em 30°C através da câmera digital acoplado ao microscópio registramos a foto do defeito (figura 3.5).

Na figura 3.5 os pontos pretos são defeitos e os comprimentos da declinação são identificados pelo número de manchas escuras que saem destes pontos pretos. Os defeitos $m = \pm 1/2$ são os pontos que possuem duas manchas escuras e o defeitos de $m = \pm 1$ são os pontos que possuem quatro manchas escuras[34].

Estas manchas escuras representam regiões onde o alinhamento médio das micelas é paralelo ou perpendicular ao plano de polarização do polarizador (figura 3.6).

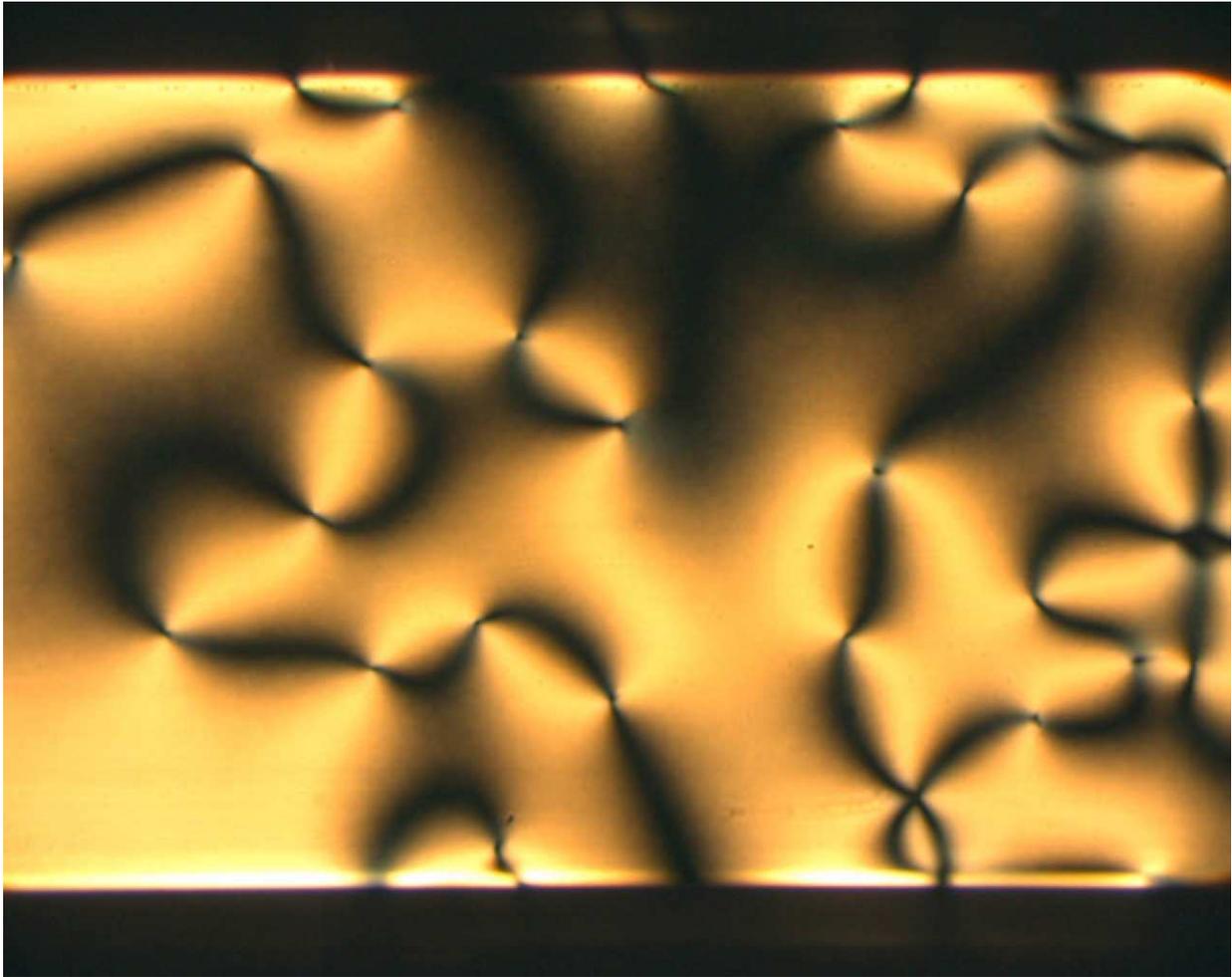


Figura 3.5: *Fotografia obtida de um cristal líquido liotrópico na fase nemático calamítico com aumento de 50×, em um capilar de 200μm de espessura.*

3.4 Intensidades de declinações

Agora, para identificar se a intensidade de declinação é positivo ou negativo adotamos o seguinte procedimento.

Giramos o polarizador de $32,5^\circ$ graus² no sentido horário e registramos uma foto. Algumas manchas giraram no sentido de giro do polarizador e outras giraram no sentido contrário (anti-horário). As que giraram no mesmo sentido são defeitos de intensidade positiva e os que giraram no sentido contrário são defeitos de intensidade negativa ou antidefeitos.

Então com as duas fotos (a foto com os polarizadores cruzados e a foto com o polarizador rotacionado) na tela do computador compara-se e identifica-se o sinal da intensidade (pintamos com bolinhas vermelhas os defeitos e bolinhas azuis os antidefeitos). A figura 3.7 representa este procedimento.

²O valor $32,5^\circ$ graus é um valor arbitrário, poderia ser qualquer outro.

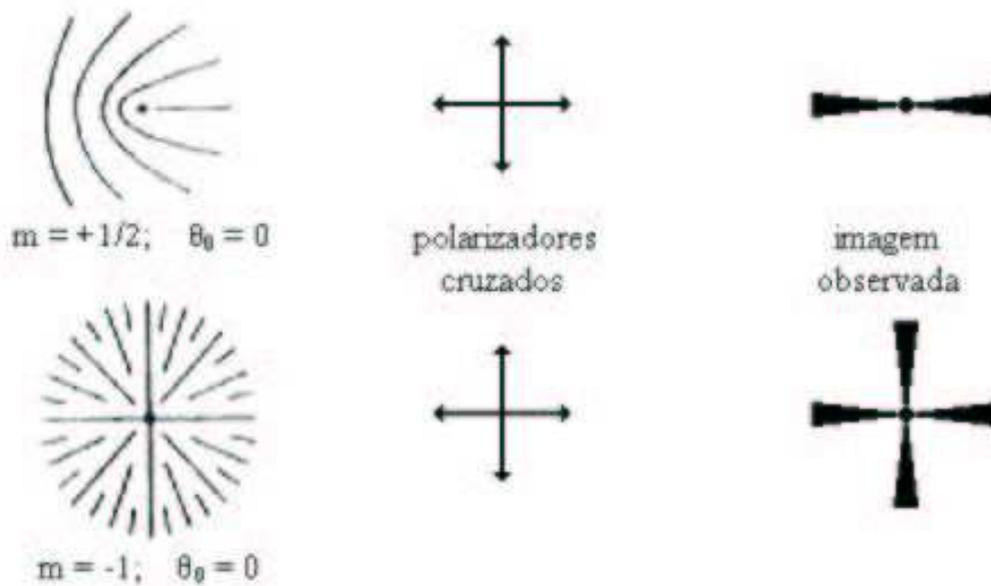


Figura 3.6: *Representação esquemática do alinhamento das micelas ao redor de uma declinação que quando observada por polarizadores cruzados produzem manchas escuras conhecida como manchas schlieren.*

É interessante notar que na figura 3.5 que temos uma incidência muito maior de $m = \pm 1/2$ do que $m = \pm 1$. É isto que discutiremos no próximo capítulo. Além de mostrar que a incidência de defeitos e antidefeitos em uma amostra de cristal líquido liotrópico obedece uma distribuição gaussiana com a mesma variância prevista pelo mecanismo de Kibble.

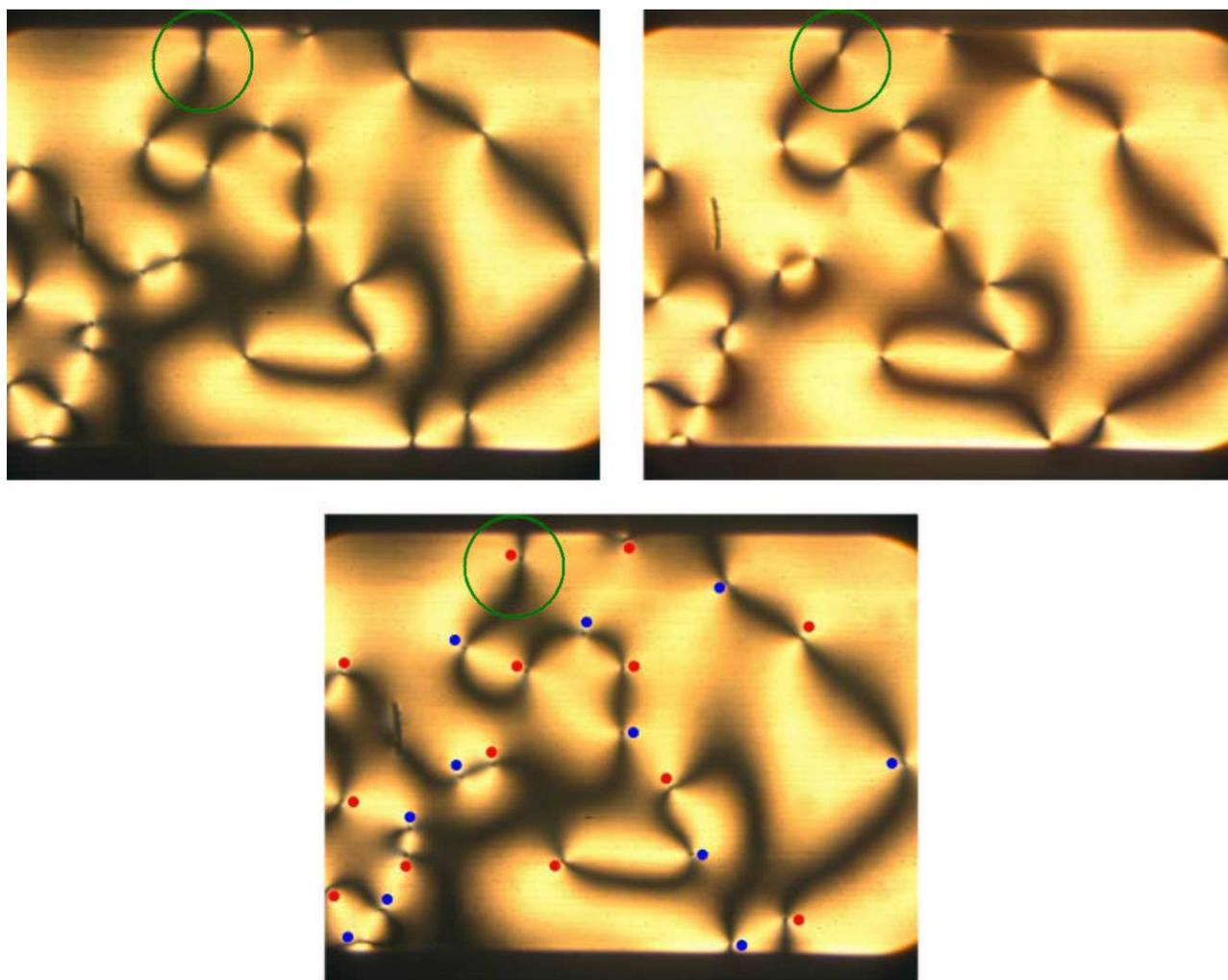


Figura 3.7: *Esta seqüência de três fotos representam o procedimento que adotamos para identificamos e distinguirmos os defeitos e os antidefeitos. O círculos verde nas fotos servem para auxiliar a identificação do sinal da intensidade de declinação.*

Capítulo 4

Análise dos Resultados

4.1 Espessura do capilar versus intensidades de declinações do defeito

Além de realizarmos as medidas com capilares de $200\mu m$ de espessura, nós também utilizamos capilares de $100\mu m$.

Nestas medidas, com capilares de $100\mu m$, nós encontramos uma incidência maior de $m = \pm 1$ do que $m = \pm 1/2$. Diferentemente do que ocorreu com as medidas utilizando capilares de $200\mu m$ (figura 4.1).

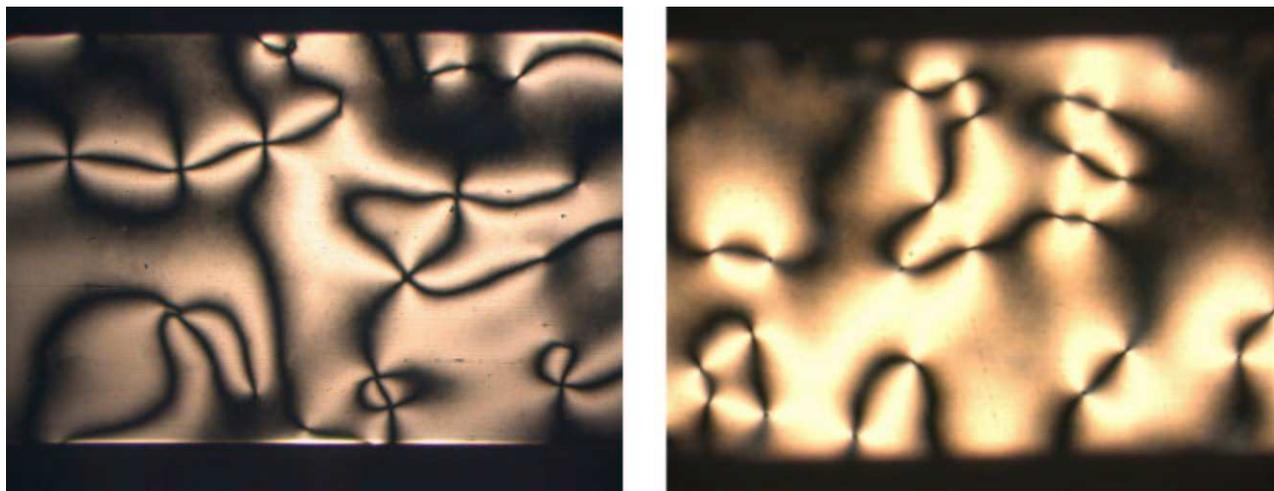


Figura 4.1: A foto a esquerda é de um capilar de $100\mu m$ de espessura e da direita é de um capilar de $200\mu m$. Ambas possuem a mesma amostra de cristal líquido liotrópico (KL/DeOH/D₂O).

A Eq.(1.12), nos mostra que defeitos com $m = \pm 1/2$ possuem energia menor do que os

defeitos de $m = \pm 1$. E os capilares de $100\mu m$ possuem uma energia de parede maior do que os capilares de $200\mu m$.

Então a formação de defeitos com $m = \pm 1$ ocorre mais em capilares de $100\mu m$ graças a contribuição da energia de parede. Ou seja, a parede do capilar fornece energia suficiente para formação de defeitos mais energéticos.

Outra diferença interessante que notamos nas medidas com diferentes espessura dos capilares foi que os defeitos formados nos capilares de $200\mu m$ eram menos susceptíveis a variação de temperatura do que os defeitos formados em capilares de $100\mu m$.

Nos capilares de $200\mu m$ era possível variar a temperatura em $5^\circ C$ sem que houvesse mudança ou destruição dos defeitos. Já os capilares de $100\mu m$ uma pequena variação na temperatura (aproximadamente 1°) era suficiente para destruir os defeitos.

4.2 Correlação entre defeitos e antidefeitos

Com os dados obtidos utilizando o método descrito no capítulo 3 fizemos um trabalho estatístico onde buscamos a correlação entre defeitos e antidefeitos. Esse trabalho consiste em dois passos:

1. Selecionamos um número máximo de regiões em cada foto onde tínhamos um total de $N = 10$ defeitos do tipo corda;
2. Em seguida contamos o número de defeitos e antidefeitos (pontos vermelhos e azuis, respectivamente) existentes naquela região e anotamos o número de defeitos menos o número de antidefeitos (Δn).

Repetimos esse mesmo procedimento para $N = 14$ e $N = 18$. E o número de regiões totais analisadas para $N = 10$ foram 112, para $N = 14$ foram 100 e para $N = 18$ foram 76 (figura 4.2).

Os dados utilizando este procedimento estão na descritos na tabela 4.1. A figura 4.3 é o gráfico da frequência da diferença entre o número de defeitos e antidefeitos que ocorreram nas regiões analisadas das fotos $f(\Delta n)$ vs. Δn .

As curvas: vermelha, verde e azul, na figura 4.3 representa o ajuste Gaussiano¹ para os pontos experimentais correspondendo a $N = 10$, $N = 14$ e $N = 18$, respectivamente.

A tabela 4.2 mostra os valores obtidos no ajuste gaussiano para nosso conjunto de três dados.

Com os dados da tabela 4.2 fizemos os gráfico de $\ln(\sigma)$ vs. $\ln(N)$ (figura 4.4) e encontramos o valor de ν através da Eq.(2.3) obtendo

$$^1 f(\Delta n) = a \exp \left\{ -\frac{1}{2} \frac{(\Delta n - \bar{\Delta n})^2}{\sigma^2} \right\}$$

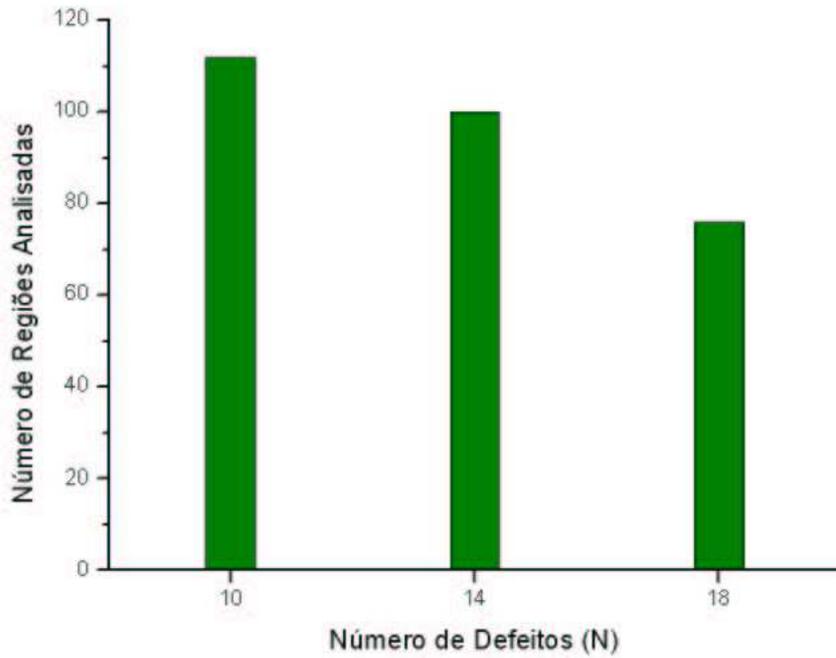


Figura 4.2: Histograma de número de regiões que contém N defeitos.

Tabela 4.1: Dados das regiões totais analisadas. Onde Δn é o número de defeitos menos o número de antidefeitos, N é o número total de defeitos e $f(\Delta n)$ é o número de vezes que Δn ocorre na região analisada.

$N \setminus \Delta n$	-4	-3	-2	-1	0	1	2	3	4
$f(\Delta n)_{N=10}$	-	0	3	23	66	19	1	0	-
$f(\Delta n)_{N=14}$	-	0	4	21	53	20	2	0	-
$f(\Delta n)_{N=18}$	0	1	5	16	37	15	2	0	0

Tabela 4.2: Resultado do ajuste gaussiano

N	a	$\overline{\Delta n}$	σ
10	$65,45 \pm 1,20$	$-0,04 \pm 0,02$	$0,65 \pm 0,01$
14	$52,02 \pm 1,51$	$-0,02 \pm 0,02$	$0,72 \pm 0,02$
18	$35,87 \pm 1,60$	$-0,03 \pm 0,04$	$0,76 \pm 0,04$

$$\nu = 0,26 \pm 0,03.$$

E este valor está em excelente concordância com o valor teórico de $1/4$ previsto pelo mecanismo de Kibble para correlação de defeitos e antidefeitos formados no Universo Primordial.

Com os valores da variância (σ), dos números de defeito e do expoente ν , nós calculamos o valor da constante de proporcionalidade da Eq.(2.3) ($\sigma = \mathbb{C}N^\nu$), e obtivemos

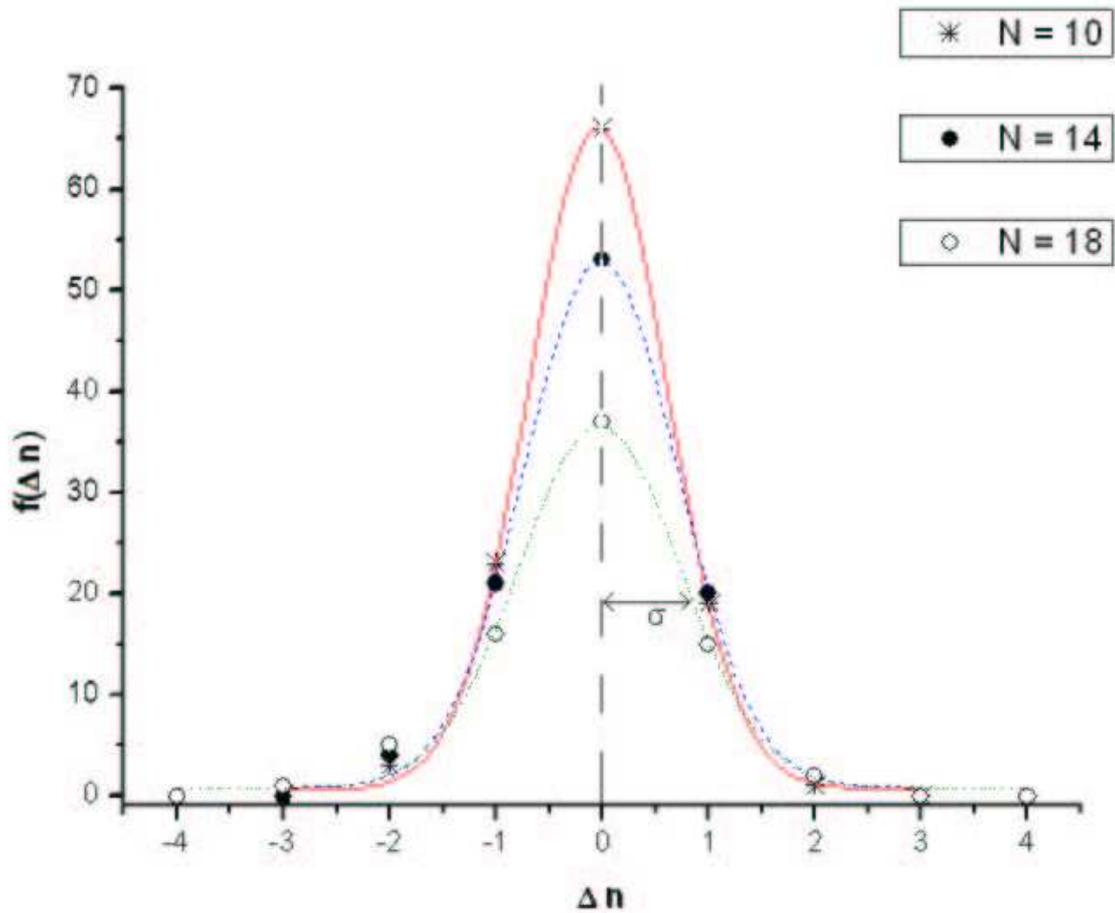


Figura 4.3: Gráfico da frequência ($f(\Delta n)$) vs. o número de defeitos menos o número de antidefeitos (Δn), utilizando os dados da tabela 4.1. O σ na figura representa a variância da distribuição.

$$C = 0,35 \pm 0,02.$$

Este valor está relacionado com fato de termos a junção de quatro domínios, formando uma rede quadrada, cuja a intensidade de defeito formado nesta situação é $m = \pm 1/2$.

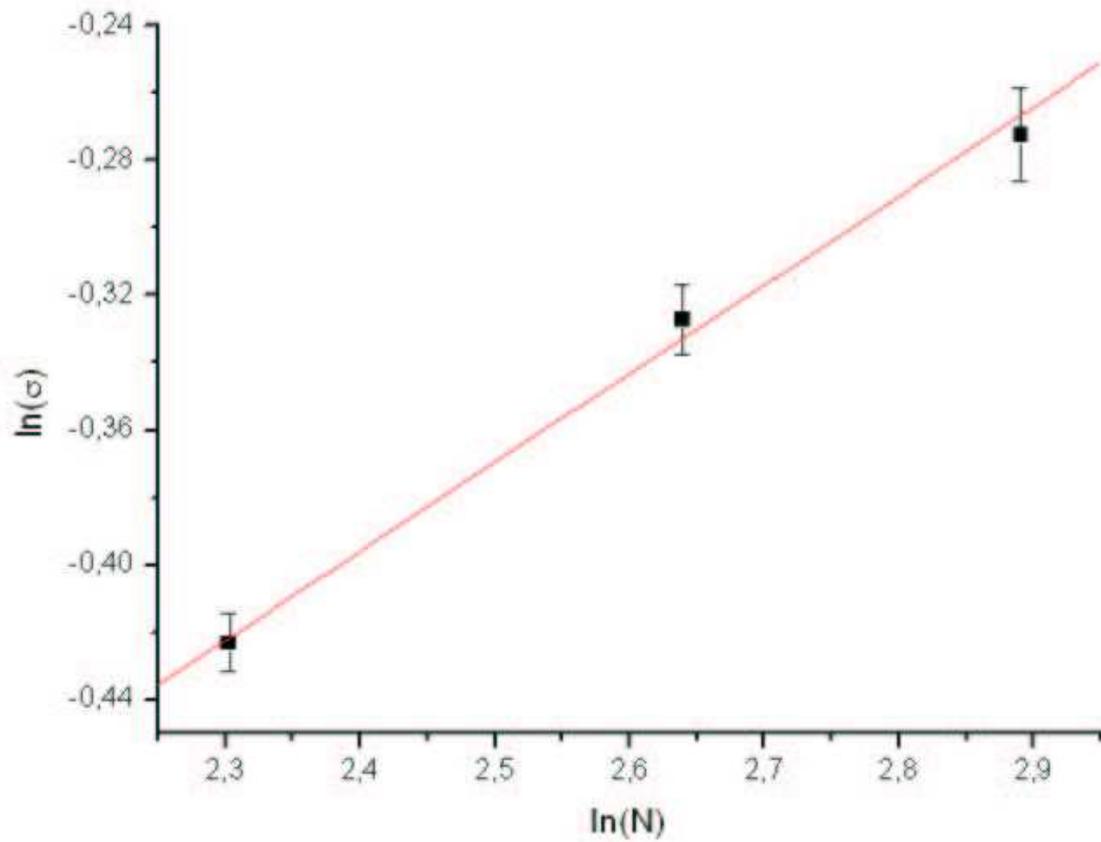


Figura 4.4: Gráfico Dilog da variância (σ) pelo número de defeitos (N). Onde determinamos o valor de ν , que neste caso vale $\nu = 0,26 \pm 0,03$.

Conclusões e Perspectivas

Neste trabalho, mostramos que o Cristal Líquido Liotrópico é um excelente laboratório cosmológico. Onde colocamos em teste um modelo conhecido como o Mecanismo de Kibble. Mecanismo este, que descreve a formação de defeitos topológicos no Universo Primordial.

Apesar de toda diferença existente entre cosmologia e cristais líquidos, ambos possuem um comportamento semelhante quando levamos em conta somente o espaço dimensional e o parâmetro de ordem espacial.

Durante o desenvolvimento deste trabalho, vimos que há muitas vantagens de se trabalhar com o cristal líquido liotrópico em relação aos termotrópicos. Além de proporcionar diferentes fases em uma única amostra, e o fato de serem sintetizados no nosso próprio laboratório, a principal delas foi o fato do CLL ser mais estável, no sentido de que mantém a textura, ou seja, o defeito é menos sensível a variação de temperatura, permitindo assim uma análise mais detalhada para se observar as declinações.

Obtivemos em nossa análise que o valor do expoente que reflete a correlação de defeitos e antidefeitos para o CLL, é de $\nu = 0,26 \pm 0,03$, que está em excelente concordância com o valor de $1/4$ previsto pelo mecanismo de Kibble para a correlação entre defeitos e antidefeitos presente no Universo Primordial. Ressaltando que para os termotrópicos $\nu = 0,26 \pm 0,11$. Mostrando assim que o nosso resultado ainda é mais preciso quando se compara com o do Universo Primordial, pois possui uma barra de erro menor (da ordem de grandeza de 10).

Analisando nosso sistema obtivemos que o valor da constante de proporcionalidade da relação entre a variância da distribuição de defeitos e antidefeitos e o número total de defeitos ($\sigma = \mathbb{C}N^\nu$) é de $\mathbb{C} = 0,35 \pm 0,02$. A este valor atribuímos o fato de termos uma junção de quatro domínios, formando um defeito com intensidade $\pm 1/2$. É interessante observar que para os termotrópico, Digal et. al, obtiveram $C = 0,71 \pm 0,21$, que analisaram como sendo uma junção de quatro domínios, mas cuja intensidade é ± 1 , o que satisfaz o tipo de defeito que obtivemos.

Também observamos que a largura do capilar, possui forte influência no tipo de intensidade do defeito. Temos assim que para capilares mais finos ($100\mu m$) obtemos defeitos de intensidade ± 1 e para capilares mais espessos ($200\mu m$) uma incidência maior de intensidade $\pm 1/2$. No momento estamos em busca do limite da variação da largura do capilar para uma melhor análise da sua influência na formação dos defeitos tipo corda.

Como perspectiva desse trabalho, propomos, entre outras, a investigação da função densidade de correlação dos defeitos e antidefeitos para cristais líquidos liotrópicos utilizando o mecanismo de Kibble como já foi feito com os termotrópicos.

Apêndice A: Densidade de Energia Elástica de Frank[35]

Como definimos no capítulo 1 a densidade de energia livre (livre de campos externos), que descreve um cristal líquido nemático não quiral depende apenas da variação do diretor

$$\mathcal{F} = \mathcal{F}(n_{i,j}); \quad n_{i,j} = \frac{\partial n_i}{\partial x_j}.$$

Se as derivadas de \vec{n} forem quantidade pequenas², então \mathcal{F} poderá ser desenvolvida em série de potências de $n_{i,j}$ em torno do estado de referência em que essas derivadas se anulam. Assim temos

$$\begin{aligned} \mathcal{F} &= \mathcal{F}_0 + \mathcal{F}_1 + \mathcal{F}_2 \dots \\ \mathcal{F} &= \mathcal{F}_0 + \left(\frac{\partial \mathcal{F}}{\partial n_{i,j}} \right)_0 n_{i,j} + \frac{1}{2} \left(\frac{\partial^2 \mathcal{F}}{\partial n_{i,j} \partial n_{i,j}} \right)_0 n_{i,j} n_{k,l} + \dots \\ \mathcal{F} &= \mathcal{F}_0 + L_{ij} n_{i,j} + \frac{1}{2} K_{ijkl} n_{i,j} n_{k,l}. \end{aligned} \quad (1)$$

Na Eq.(1) introduzimos os tensores elásticos

$$L_{ij} = \left(\frac{\partial \mathcal{F}}{\partial n_{i,j}} \right)_0 \quad \text{e} \quad K_{ijkl} = \left(\frac{\partial^2 \mathcal{F}}{\partial n_{i,j} \partial n_{k,l}} \right)_0,$$

com o índice 0 para indicar que as derivadas são calculadas no estado de referência, isto é, no estado não deformado. Os tensores elásticos \mathbf{L} e \mathbf{K} não são conhecidos. Contudo, em vista da simetria da fase nemática, eles podem ser escritos em termos dos elementos de simetria do meio nemático. Em termos práticos podemos escrever esses tensores como combinações dos produtos apropriados das componentes de \vec{n} , da delta de Kronecker, δ_{ij} , e do tensor antissimétrico de Levi-Civita, ϵ_{ijk} . No caso do tensor de segunda ordem \mathbf{L} , podemos escrever

$$L_{ij} = L_1 n_i n_j + L_2 \delta_{ij} + L_3 n_k \epsilon_{ijk},$$

²O que equivale a admitir que as distorções são pequenas ao longo de uma distância da ordem das dimensões micelares/moleculares

onde L_i são escalares desconhecidos.

O primeiro termo das componentes de L_{ij} é formado por um produto de duas componentes de \vec{n} e o segundo termo apenas pela delta de Kronecker. Substituindo esses dois termos na Eq.(1) encontraremos problemas. Pois esses dois termos violam o requisito de indistinguibilidade entre os estados \vec{n} e $-\vec{n}$. Assim para que essa simetria seja levada em conta devemos impor que $L_1 = L_2 = 0$. Resta-nos agora, o último termo das componentes de L_{ij} . Esta componente nos fornece uma contribuição para \mathcal{F} , linear na primeira derivada do diretor, na forma

$$\mathcal{F}_1 = L_{ij}n_{i,j} = L_3 n_k \epsilon_{kij} n_{i,j} = L_3 \left(\vec{n} \cdot \vec{\nabla} \times \vec{n} \right). \quad (2)$$

Consideremos, agora, o tensor de quarta ordem $K_{ijkl} = K_{klij}$. Um tensor como este tem oitenta e uma componentes! E pode ser decomposto de maneira semelhante à empregada na decomposição de L_{ij} , ou seja,

$$\begin{aligned} K_{ijkl} = & k_1 n_i n_j n_k n_l + k'_2 n_i n_j \delta_{kl} + k''_2 n_k n_l \delta_{ij} + k_3 n_i n_k \delta_{jl} + k'_4 n_i n_l \delta_{jk} + k''_4 n_j n_k \delta_{kl} + \\ & + k_5 n_j n_l \delta_{ik} + k_6 \delta_{ij} \delta_{kl} + k_7 \delta_{ik} \delta_{jl} + k_8 \delta_{il} \delta_{jk}. \end{aligned}$$

Aqui, introduzimos dez coeficientes desconhecidos para os dez termos possíveis. Contudo verifica-se que os coeficientes que denotamos com uma ou duas linhas (') estão diante de termos que dão a mesma contribuição em vista da simetria. Em outras palavras poderíamos ter escrito

$$\begin{aligned} K_{ijkl} = & k_1 n_i n_j n_k n_l + \frac{1}{2} k_2 (n_i n_j \delta_{kl} + n_k n_l \delta_{ij}) + k_3 n_i n_k \delta_{jl} + \frac{1}{2} k_4 (n_i n_l \delta_{jk} + n_j n_k \delta_{kl}) \\ & + k_5 n_j n_l \delta_{ik} + k_6 \delta_{ij} \delta_{kl} + k_7 \delta_{ik} \delta_{jl} + k_8 \delta_{il} \delta_{jk}. \end{aligned} \quad (3)$$

Usando a Eq.(3) verifica-se que K_{ijkl} é, em princípio caracterizado por oito números. Entretanto, considerando que $(\vec{n} \cdot \vec{n}) = n_i n_i = 1$, os termos que tenham a forma $n_i n_{i,j}$ se anulam, pois $n_i n_{i,j} = \partial_j (n_i n_i) / 2 = 0$. Assim, quando substituirmos (3) em (1) descobrimos que $k_i = 0$ quando $i = 1, 2, 3, 4$. Então as quantidades restantes são

$$\begin{aligned} k_5 n_j n_l \delta_{ik} &= k_5 \left(\vec{n} \times \vec{\nabla} \times \vec{n} \right)^2, \\ k_6 \delta_{ij} \delta_{kl} &= k_6 \left(\vec{\nabla} \cdot \vec{n} \right)^2, \\ k_7 \delta_{ik} \delta_{jl} &= k_7 n_{k,j} n_{k,j}, \\ k_8 \delta_{il} \delta_{jk} &= k_8 n_{i,j} n_{i,j}. \end{aligned} \quad (4)$$

Desse modo, a contribuição, quadrática na primeira derivada, à densidade de energia elástica pode ser escrita como

$$\mathcal{F}_2 = \frac{1}{2} K_{ijkl} n_{i,j} n_{k,l} = \frac{1}{2} \left[k_5 \left(\vec{n} \times \vec{\nabla} \times \vec{n} \right)^2 + k_6 \left(\vec{\nabla} \cdot \vec{n} \right)^2 + k_7 n_{k,j} n_{k,j} + k_8 n_{i,j} n_{i,j} \right].$$

Escrevendo que

$$n_{k,j}n_{k,j} = n_{k,j}n_{k,j} + \left(\vec{n} \cdot \vec{\nabla} \times \vec{n}\right)^2,$$

e que

$$n_{k,j}n_{j,k} = \left(\vec{\nabla} \cdot \vec{n}\right)^2 - \vec{\nabla} \cdot \left(\vec{n}\vec{\nabla} \cdot \vec{n} + \vec{n} \times \vec{\nabla} \times \vec{n}\right),$$

podemos, desta forma, reescrever o conjunto de equações (4) na seguinte forma

$$\begin{aligned} \mathcal{F}_2 &= \frac{1}{2}(k_6 - k_7 + k_8) \left(\vec{\nabla} \cdot \vec{n}\right)^2 + \frac{1}{2}k_7(\vec{n} \cdot \vec{\nabla} \times \vec{n})^2 + \frac{1}{2}(k_5 + k_7) \left(\vec{n} \times \vec{\nabla} \times \vec{n}\right)^2 + \\ &- (k_7 + k_8) \vec{\nabla} \cdot \left(\vec{n}\vec{\nabla} \cdot \vec{n} + \vec{n} \times \vec{\nabla} \times \vec{n}\right). \end{aligned} \quad (5)$$

Substituindo (2) e (5) em (1) obtemos

$$\begin{aligned} \mathcal{F} &= \frac{1}{2}K_{11} \left(\vec{\nabla} \cdot \vec{n}\right)^2 + \frac{1}{2}K_{22} \left(\vec{n} \cdot \vec{\nabla} \times \vec{n}\right)^2 + \frac{1}{2}K_{33} \left(\vec{n} \times \vec{\nabla} \times \vec{n}\right)^2 + \\ &- (K_{22} + K_{24}) \vec{\nabla} \cdot \left(\vec{n}\vec{\nabla} \cdot \vec{n} + \vec{n} \times \vec{\nabla} \times \vec{n}\right). \end{aligned} \quad (6)$$

onde $k_6 - k_7 + k_8 = K_{11}$, $k_7 = K_{22}$, $k_5 + k_7 = K_{33}$ e $k_8 = K_{24}$.

A equação (6) é a expressão de Frank para a energia elástica por unidade de volume de um nemático. As quantidades K_{11} , K_{22} , K_{33} e $(K_{22} + K_{24})$ são conhecidas como constante elástica de *splay* (divergência ou afunilamento), *twist* (torção), *bend* (flexão) e *saddle-splay*, respectivamente.

A constante $(K_{22} + K_{24})$ representa uma deformação na superfície do nemático. Então quando estamos tratando de um meio contínuo essa contribuição não deve ser levada em conta.

Apêndice B: Configuração do Diretor ao Redor de uma Declinação

A equação abaixo, encontrada na seção 1.5, descreve a configuração do diretor ao redor de uma declinação

$$\theta(\phi) = m\phi + \theta_0 \quad ; \quad m = \pm\frac{1}{2}, \pm 1, \pm\frac{3}{2}, \dots \quad (7)$$

Vamos utilizar a equação acima para construirmos a configuração do diretor ao redor de uma declinação para o caso onde $\theta_0 = 0$ e $m = 1$ (figura 5).

Antes de construir a configuração do diretor devemos nos lembrar que ϕ é o ângulo que localiza uma micela no plano polar e θ é o ângulo que o diretor da micela faz com o plano cartesiano no sentido anti-horário.

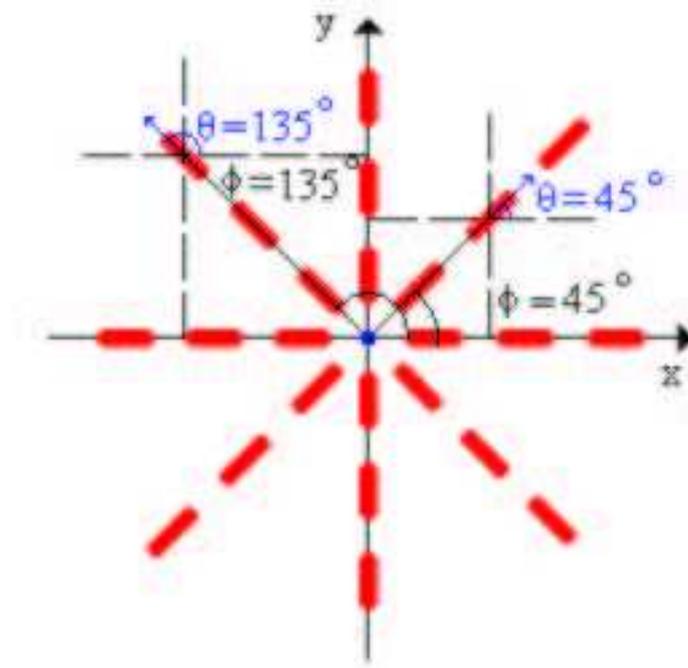


Figura 5: *Configuração do diretor ao redor de uma declinação com intensidade $m = +1$ (isotrópico).*

Apêndice C: Grupos de Simetria

Nome do Grupo	Matrizes do Grupo
U(n)	Matriz Unitária $n \times n$ ($\tilde{U}^*U = 1 \rightarrow U^{-1} = \tilde{U}^*$)
SU(n)	Matriz Unitária $n \times n$ com determinante igual a 1 ($S \rightarrow special$)
O(n)	Matriz Ortogonal $n \times n$ ($\tilde{O}O = 1 \rightarrow O^{-1} = O$)
SO(n)	Matriz Ortogonal $n \times n$ com determinante igual a 1.

Tabela 3: Principais Grupos de Simetria[36].

Podemos citar alguns exemplos destas simetrias na em sistemas físicos, tais como,

Eletromagnetismo: O grupo associado U(1) está associado com as forças elétricas e magnéticas.

Força Eletrofraca: O grupo de simetria associada a esta força é SU(2)×U(1).

Força Nuclear Forte: Grupo de simetria que descreve esta força fundamental é SU(3).

Espaço Isotrópico: Um espaço isotrópico não há direção privilegiada, ou seja, o sistema possui uma simetria rotacional e pelo teorema de Noether este espaço tem seu momento angular conservado. E a grupo de simetria que descreve este espaço é a simetria SO(3).

Apêndice D: Dados Experimentais do Cristal Líquido Liotrópico

A seqüência dos dados experimentais a seguir é da nossa amostra de cristal líquido liotrópico (KL/DeOH/D₂O). Os pontos azuis nas fotos representam defeitos com intensidade negativa e os pontos vermelhos representam defeitos com comprimento da intensidade positivo. As figuras 34 e 35 foram obtidas utilizando capilares de 100 μm de espessura, as demais foram obtidas utilizando capilares 200 μm .

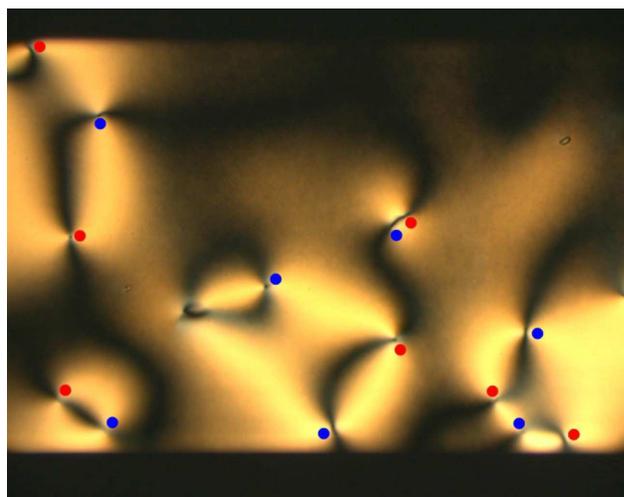


Figura 6: $N = 14$, $N_+ = 7$ e $N_- = 7$.

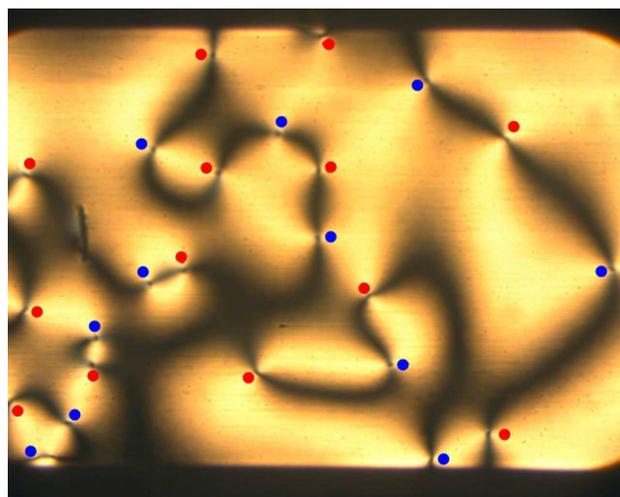


Figura 7: $N = 24$, $N_+ = 13$ e $N_- = 11$.

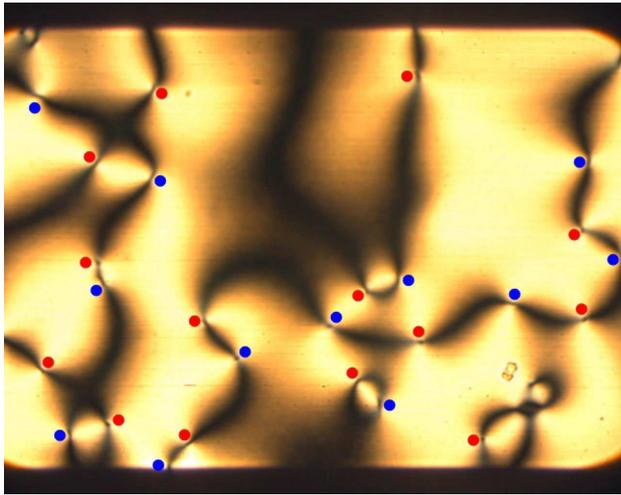


Figura 8: $N = 26$, $N_+ = 14$ e $N_- = 12$.

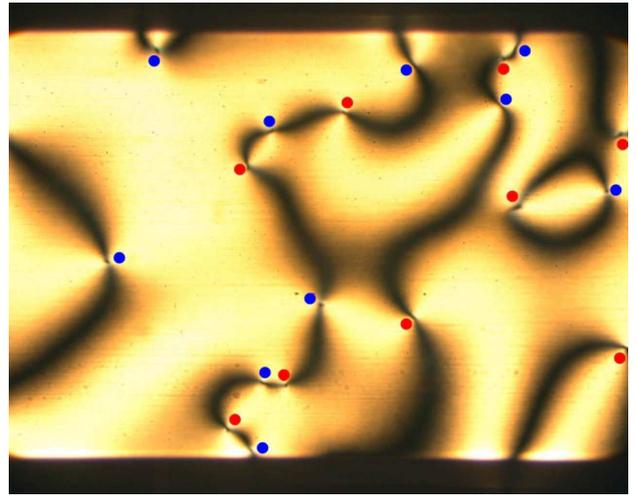


Figura 9: $N = 24$, $N_+ = 12$ e $N_- = 12$.

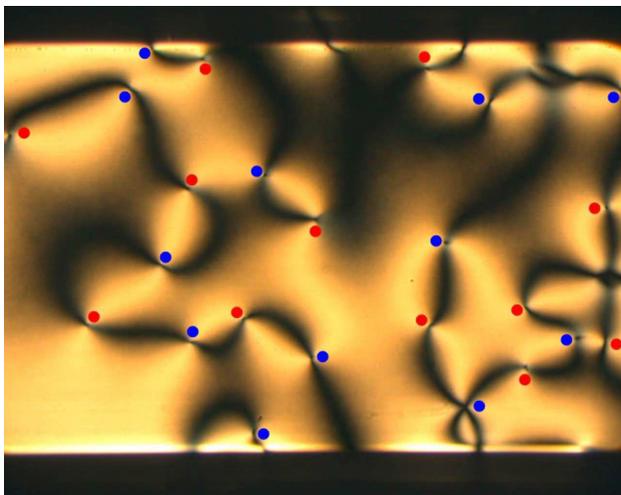


Figura 10: $N = 32$, $N_+ = 15$ e $N_- = 17$.

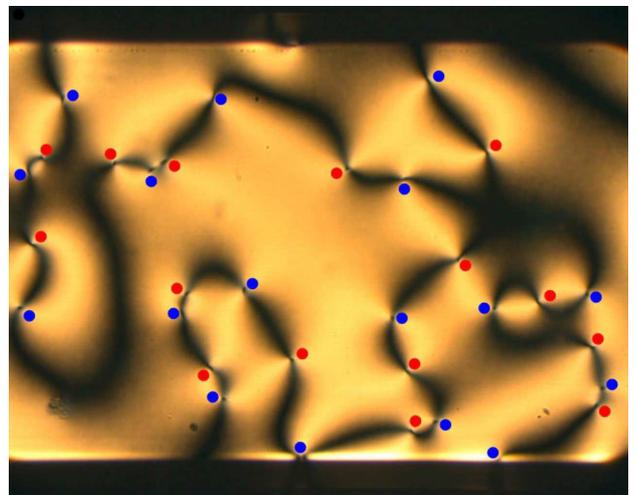


Figura 11: $N = 16$, $N_+ = 6$ e $N_- = 10$.

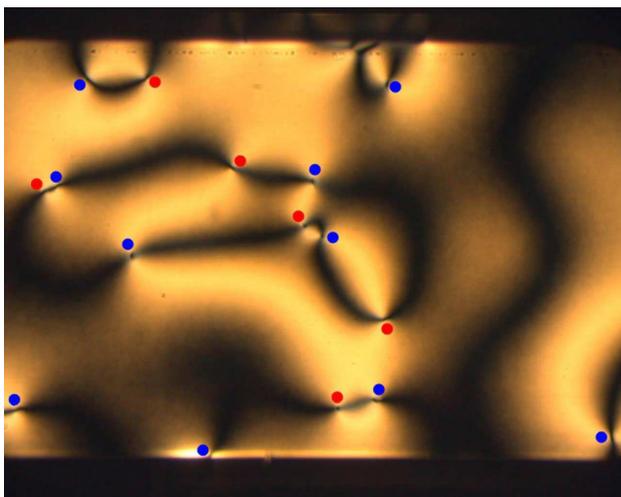


Figura 12: $N = 16$, $N_+ = 6$ e $N_- = 10$.

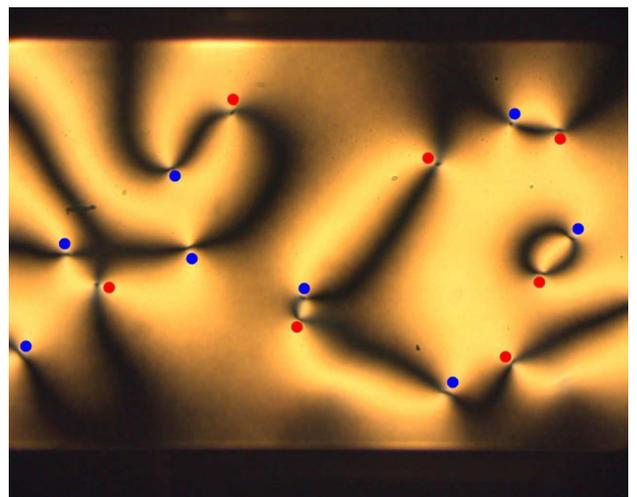


Figura 13: $N = 15$, $N_+ = 7$ e $N_- = 8$.

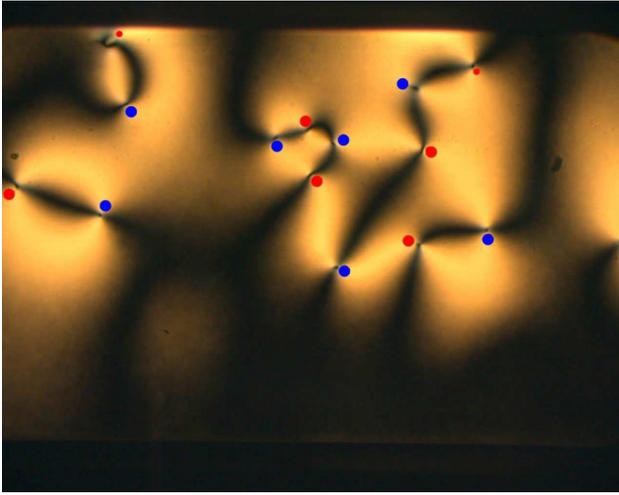


Figura 14: $N = 14$, $N_+ = 7$ e $N_- = 7$.

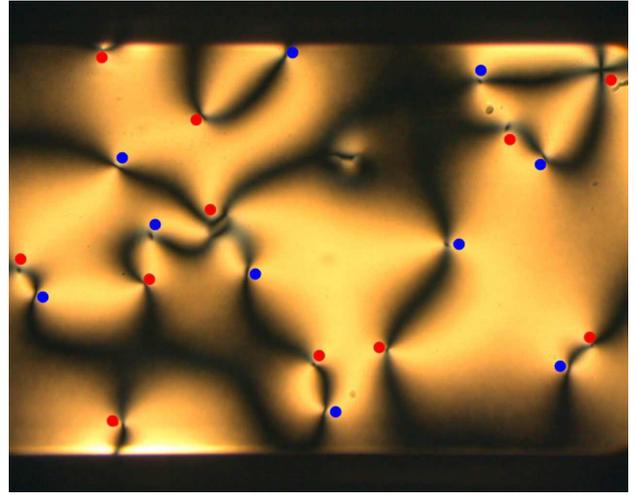


Figura 15: $N = 21$, $N_+ = 11$ e $N_- = 10$.

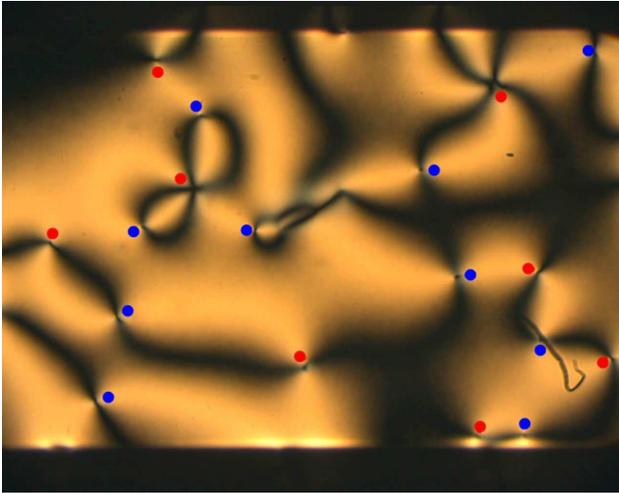


Figura 16: $N = 18$, $N_+ = 8$ e $N_- = 10$.

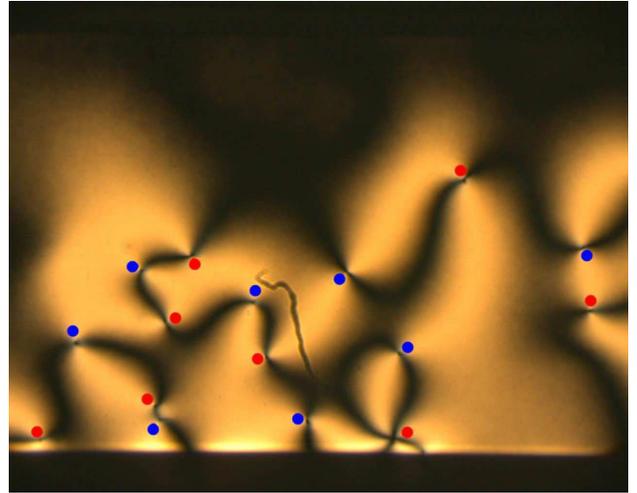


Figura 17: $N = 16$, $N_+ = 8$ e $N_- = 8$.

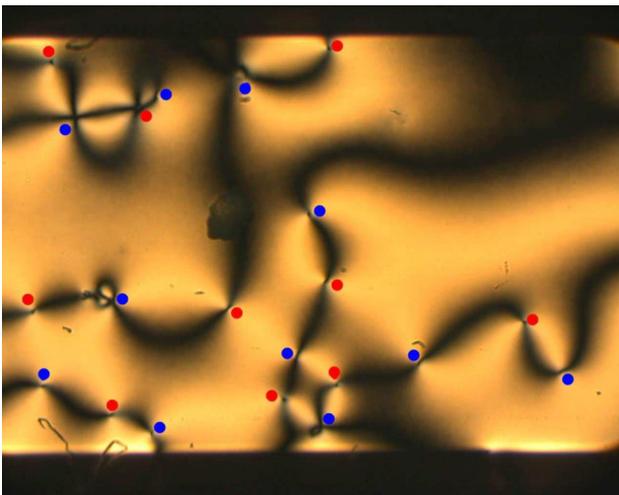


Figura 18: $N = 21$, $N_+ = 10$ e $N_- = 11$.

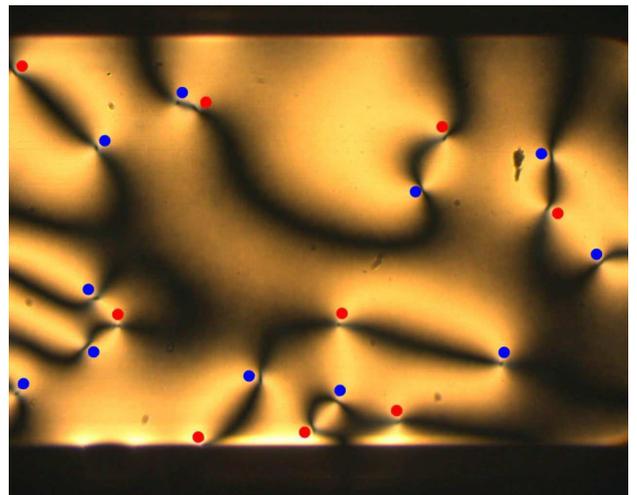


Figura 19: $N = 20$, $N_+ = 9$ e $N_- = 11$.

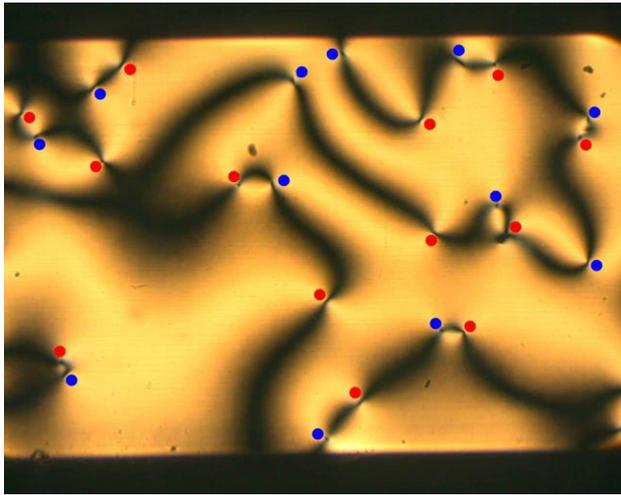


Figura 20: $N = 24$, $N_+ = 12$ e $N_- = 12$.

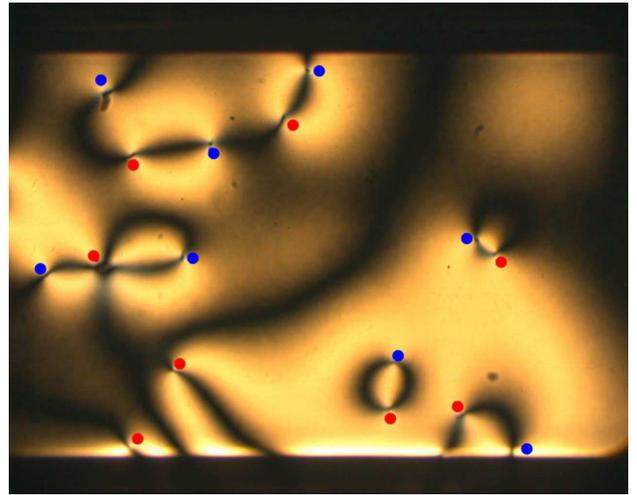


Figura 21: $N = 16$, $N_+ = 8$ e $N_- = 8$.

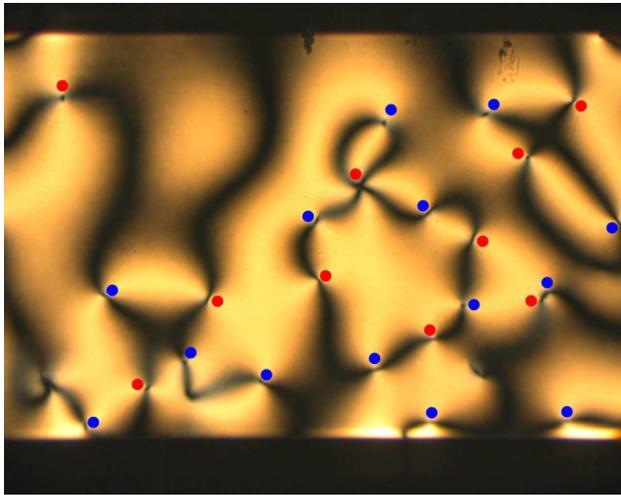


Figura 22: $N = 24$, $N_+ = 10$ e $N_- = 14$.

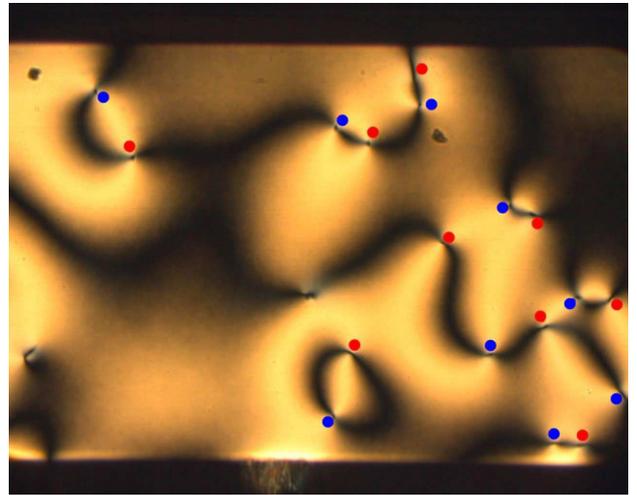


Figura 23: $N = 18$, $N_+ = 9$ e $N_- = 9$.

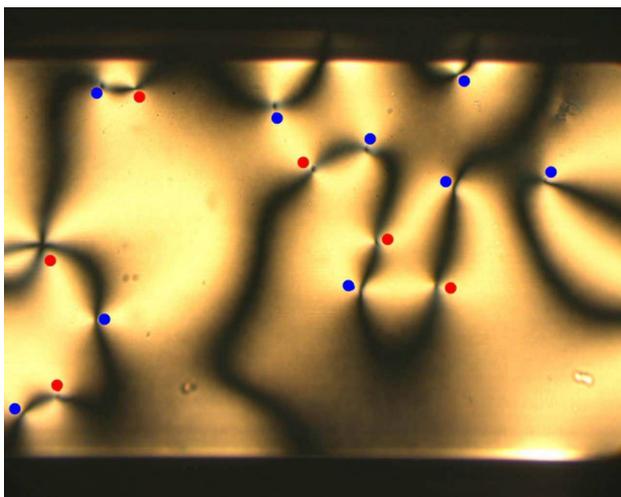


Figura 24: $N = 15$, $N_+ = 6$ e $N_- = 9$.

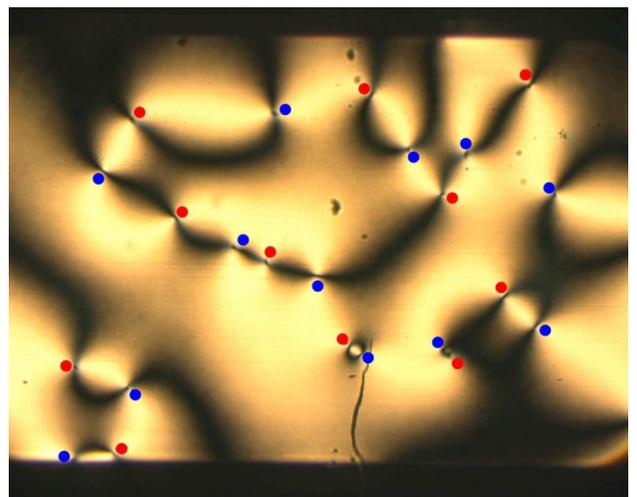


Figura 25: $N = 23$, $N_+ = 11$ e $N_- = 12$.

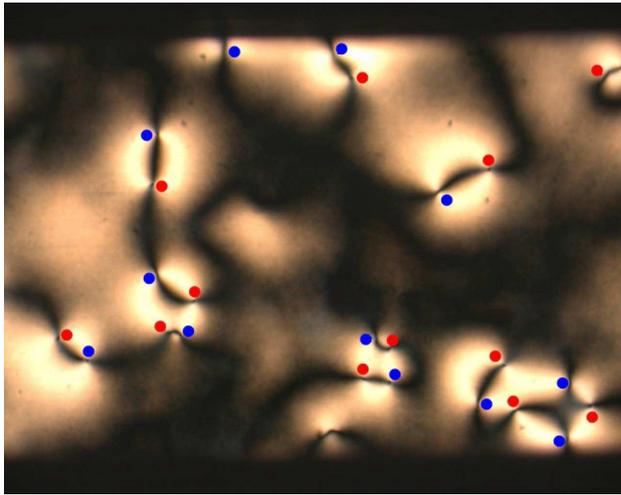


Figura 26: $N = 24$, $N_+ = 12$ e $N_- = 12$.

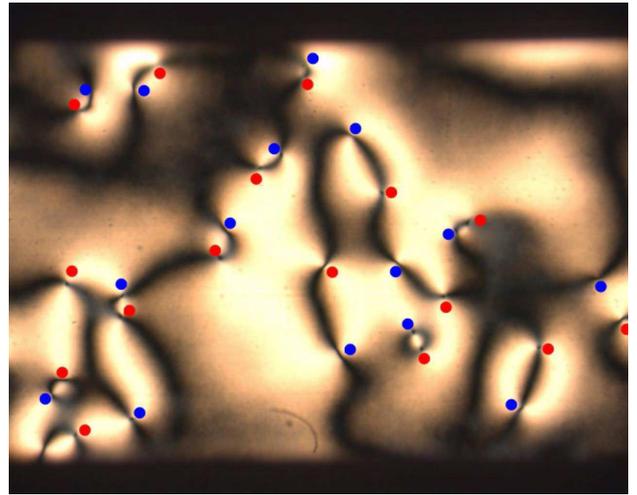


Figura 27: $N = 31$, $N_+ = 16$ e $N_- = 15$.

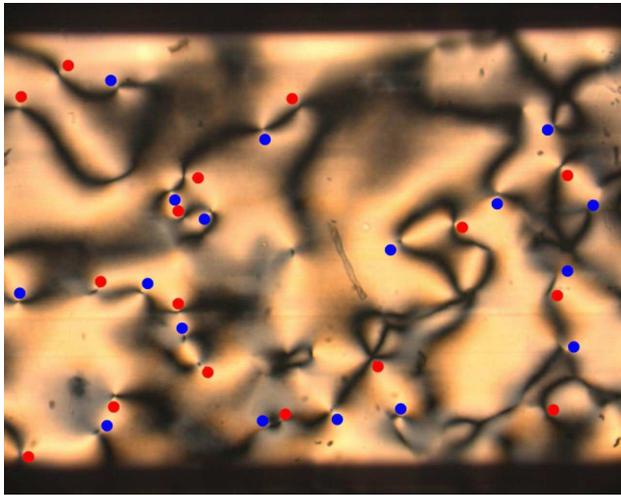


Figura 28: $N = 33$, $N_+ = 16$ e $N_- = 17$.

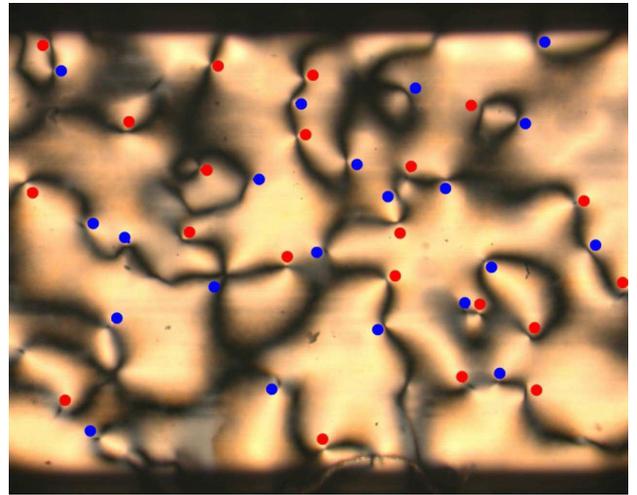


Figura 29: $N = 42$, $N_+ = 21$ e $N_- = 21$.

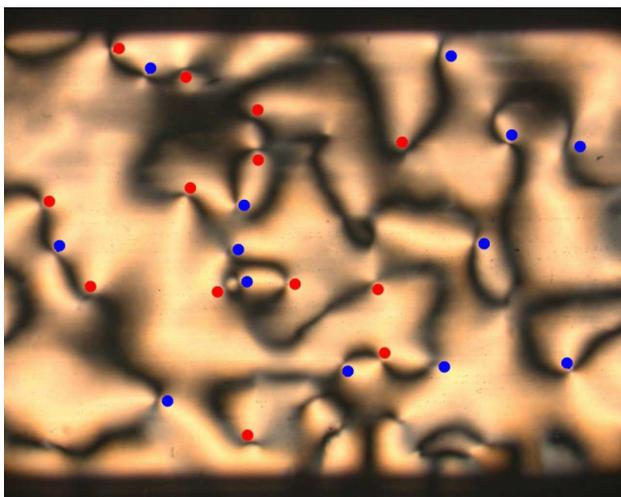


Figura 30: $N = 26$, $N_+ = 13$ e $N_- = 13$.

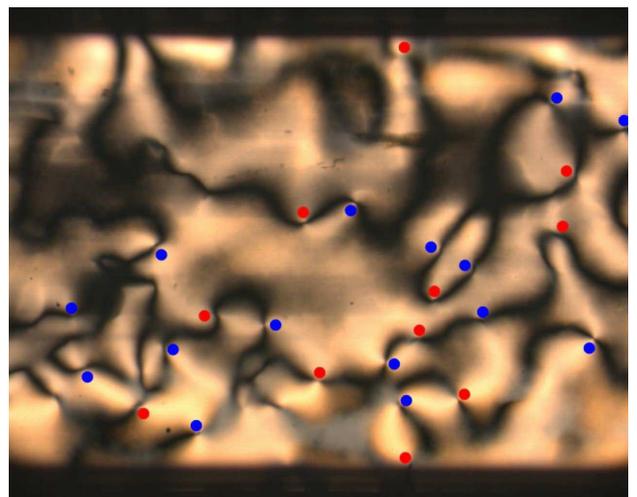


Figura 31: $N = 26$, $N_+ = 11$ e $N_- = 15$.

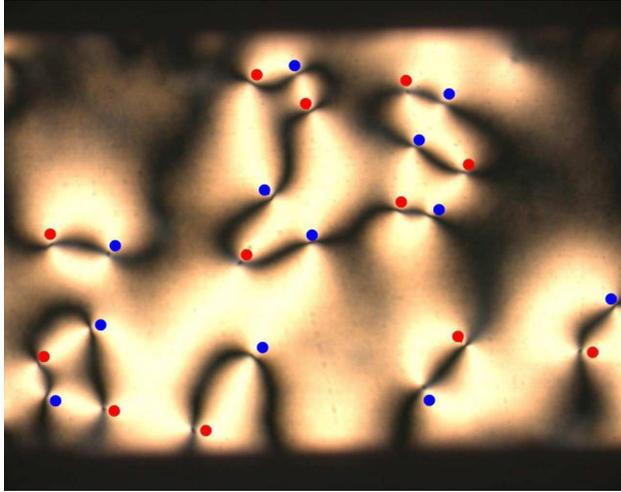


Figura 32: $N = 24$, $N_+ = 12$ e $N_- = 12$.

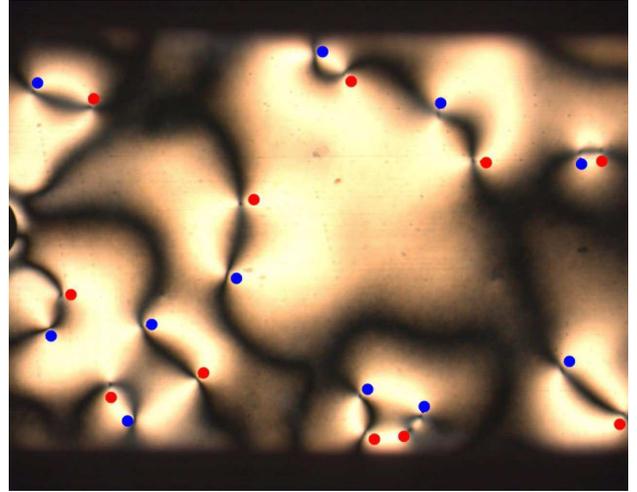


Figura 33: $N = 22$, $N_+ = 11$ e $N_- = 11$.

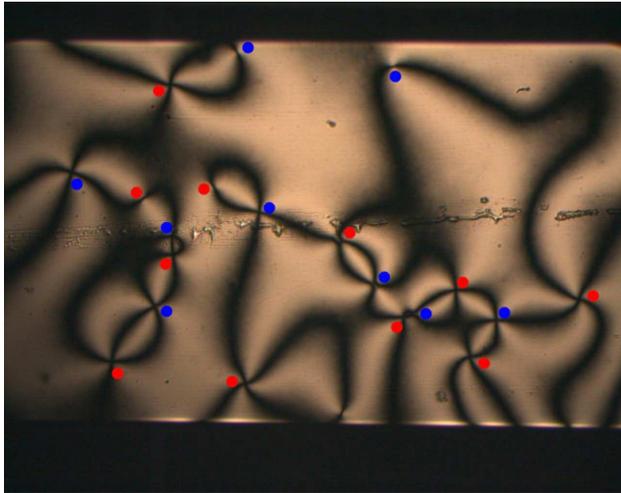


Figura 34: $N = 20$, $N_+ = 11$ e $N_- = 9$.

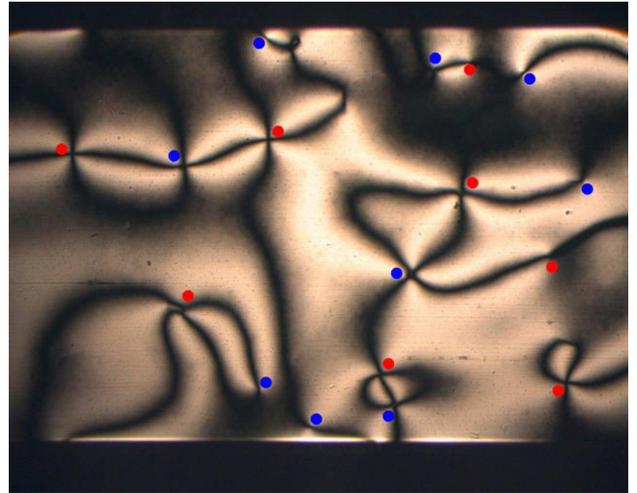


Figura 35: $N = 17$, $N_+ = 8$ e $N_- = 9$.

Bibliografia

- [1] T. W. B. Kibble, *J. Phys.*, **A9**, 1387 (1976).
- [2] W. H. Zurek, *Nature*, **317**, 505 (1985).
- [3] I. Chuang, R. Durrer, N. Turok and B. Yurk, *Science*, **251**, 1336 (1991).
- [4] F. Reinitzer, *Mh. Chem.*, **9**, 421 (1888).
- [5] O. Lehmann, *Z. Phys. Chem.*, **4**, 462 (1889).
- [6] I. M. Laczkowski, *Dissertação de Mestrado*, DFI/UEM - Maringá-PR (2005).
- [7] P. G. de Gennes, *The Physics of Liquid Crystals*, Second Edition, Clarendon, Oxford (1993).
- [8] G. W. Gray and P. A. Wilson, *Liquid Crystal and Plastic Crystal*, vol.1, Ellis Horwood Limited, New York (1974).
- [9] E. B. Priestley, *Introduction to Liquid Crystals*, Plenum Press, New York (1979).
- [10] P. J. Collings and M. Hird, *Introduction to Liquid Crystals Chemistry and Physics*, Taylor and Francis Ltd. (1997).
- [11] S. Chandrasekhar, *Liquid Crystal*, Cambridge University Press, Cambridge (1980).
- [12] Y. Hendriks, J. Charvolin, M. Rawiso, L. Liébert and M.C. Holmes, *J. Phys. Chem.*, **87**, 3991 (1983).
- [13] P. R. G. Fernandes, *Dissertação de Mestrado*, USP, São Paulo-SP, (1990).
- [14] P. R. G. Fernandes, *Patente Brasileira: Sensor de Vibrações Mecânicas Utilizando Cristais Líquidos*, PI9805500-3/UEM (1998).
- [15] A. M. Figueiredo Neto, L. Liébert and Y. Galerne, *J. Phys. Chem.*, **89**, 3737 (1985).
- [16] T. Kroin, A. J. Palangana and A. M. Figueiredo Neto, *Phys. Rev.*, **A39**, 5373 (1989).
- [17] G. Toulouse and M. Kléman, *J. Phys. Lett.*, **37**, L-149 (1976), N. D. Mermin, *Rev. of Mod. Phys.*, **51**, 591 (1979).

- [18] G. E. Volovik and V. P. Mineyrov, *Zh. Eksp. Teor. Fiz. (CCCP)*, **72**, 2256 (1977).
- [19] O. D. Laventrovich, *Nematic Liquid Crystal: Defects*, Encyclopedia of Materials: Science and Technology, Science Direct, pp.6071-6076 (2001).
- [20] A. Vilenkin and E. P. S. Shellard, *Cosmic String and Other Topological Defects*, Cambridge University Press, Cambridge (1994).
- [21] R. Ray and A. M. Srivastava, *Phys. Rev.*, **D69**, 103525 (2004).
- [22] P. J. E. Peebles, *Principles of Physical Cosmology*, Princenton University Press, New Jersey (1993).
- [23] L. Kawano, *Ph. D. Thesis*, The University of Chicago (1989).
- [24] E. W. Kolb and M. S. Turner, *The Early Universe*, Addison-Wesley Publishing Company (1993).
- [25] T. W. B. Kibble, *Australian Journal of Physics*, **50**, 697 (1997).
- [26] A. Vilenkin, *Phys. Rev.*, **D23**, 852 (1981).
- [27] A. Albrecht and N. Turok, *Phys. Rev. Lett.*, **54**, 1868 (1985).
- [28] H. R. Pagels, *Perfect Symmetry, The Search for the Beginning of Time*, Simon and Schuster (1985).
- [29] W. H. Zurek, *Phys. Rep.*, **276**, 177 (1996); P. Laguna and W. H. Zurek, *Phys. Rev. Lett.*, **78**, 2519 (1997); A. Yates and W. H. Zurek, *Phys. Rev. Lett.*, **80**, 5477 (1998); L. M. A. Bettencourt, N. D. Antunes, and W. H. Zurek, *Phys. Rev.*, **D62**, 065005 (2000).
- [30] T. W. B. Kibble, *Phys. Rept.*, **67**, 183 (1980).
- [31] S. Digal, R. Ray and A. M. Srivastava *Phys. Rev. Lett.*, **83**, 5030 (1999).
- [32] M. J. Bowick, L. Chandar, E. A. Schiff and A. M. Srivastava, *Science*, **263**, 943 (1994).
- [33] C. Sátiro and F. Moraes, *Mod. Phys. Lett.*, **A20**, 2561 (2005).
- [34] S. Chandrasekhar and G. S. Ranganath, *Adv. in Phys.*, **35**, 507 (1986).
- [35] G. Barbero and L. R. Evangelista, *An Elementary Course on the Continuum Theory for Nematic Liquid Crystals*, World Scientific, Singappore (2000).
- [36] D. Griffiths, *Introduction to Elementary Particles*, John Wiley & Sons Inc. (1987).