

---

Universidade Estadual de Maringá  
Centro de Ciências Exatas  
Departamento de Física  
Programa de Pós-Graduação em Física

Renato Ferreira de Souza

**Influência da Viscosidade de Superfície,  
Energia de Ancoramento, Espessura e Ângulo  
na Superfície no Tempo de Relaxamento de  
Cristais Líquidos Nemáticos**

Maringá, 2013

---

Renato Ferreira de Souza

**Influência da Viscosidade de Superfície,  
Energia de Ancoramento, Espessura e Ângulo  
na Superfície no Tempo de Relaxamento de  
Cristais Líquidos Nemáticos.**

Orientador: Prof. Dr. Luiz Roberto Evangelista  
Coorientador: Prof. Dr. Rafael Soares Zola

Dissertação submetida ao Programa de  
Pós-Graduação em Física da Universidade  
Estadual de Maringá para obtenção do tí-  
tulo de Mestre em Física.

Maringá, 2013

Dados Internacionais de Catalogação na Publicação (CIP)  
(Biblioteca Central - UEM, Maringá, PR, Brasil)

S729i Souza, Renato Ferreira de  
Influência da viscosidade de superfície, energia de ancoramento, espessura e ângulo na superfície no tempo de relaxamento de cristais líquidos nemáticos / Renato Ferreira de Souza. -- Maringá, 2013.  
99 f. : il. (algumas color.), figs., tabs.

Orientador: Prof. Dr. Luiz Roberto Evangelista.  
Coorientador: Prof. Dr. Rafael Soares Zola.  
Dissertação (mestrado) - Universidade Estadual de Maringá, Centro de Ciências Exatas, Departamento de Física, Programa de Pós-Graduação em Física, 2013.

1. Cristal líquido. 2. Cristal líquido - Viscosidade de superfície. 3. Cristal líquido - Tempo de resposta. I. Evangelista, Luiz Roberto, orient. II. Zola, Rafael Soares, coorient. III. Universidade Estadual de Maringá. Centro de Ciências Exatas. Departamento de Física. Programa de Pós-Graduação em Física. IV. Título.

CDD 21.ed. 530.429

AMMA-001247

# Agradecimentos

Aos meus pais, por todo amor e apoio essenciais em todos esses longos anos.

Ao professor Dr. Rafael Soares Zola, pela atenção, disposição e paciência.

Ao professor Dr. Luiz Roberto Evangelista, por todo apoio e incentivo.

A todos os amigos que direta ou indiretamente contribuíram para a conclusão deste trabalho.

À CAPES, pelo suporte financeiro.

# Resumo

Neste trabalho, estudamos numérica e analiticamente a influência da viscosidade de superfície nos tempos característicos de relaxação de uma célula de cristal líquido nemático. A equação que descreve o relaxamento foi obtida a partir da equação da energia livre de Frank e do modelo de Derzhanski e Petrov para as condições de contorno. Essas equações foram resolvidas analiticamente para o caso de pequenas deformações e de constantes elásticas com valores muito próximos. Para a realização do estudo, escolhemos a geometria de alinhamento vertical e um cristal líquido com anisotropia dielétrica negativa. Também, foi desenvolvido um algoritmo capaz de resolver essas equações numericamente sem nenhum tipo de aproximação. Utilizando esse algoritmo, obtivemos a distribuição do diretor em função do tempo ao longo da célula. A partir desse resultado, foram obtidos os tempos de relaxação do sistema, com os quais analisamos como a variação de alguns parâmetros influenciam cada um dos tempos característicos deles, em especial, a viscosidade de superfície. Com isso, uma comparação com os resultados analíticos foi realizada. Os resultados indicam que, sob certas circunstâncias, a viscosidade de superfície é crucial para a determinação correta dos tempos de relaxação do sistema. Essas situações são importantes do ponto de vista industrial. Experimentalmente, ainda não foram desenvolvidas técnicas capazes de identificar o valor da viscosidade de superfície para a geometria estudada. Dessa forma, esperamos que este trabalho aponte para situações em que esse parâmetro possa ser medido com mais facilidade.

# Abstract

In this work we study the role of the surface viscosity on the relaxation times of a nematic liquid crystal cell. The equations were obtained from the Frank free energy and the Derzhanski and Petrov model for the boundary conditions. These equation were solved when the director angles are small and the elastic constants are approximately the same. To realize this work the vertical alignment geometry was chosen. A numerical algorithm was also designed to solve the equations without any kind of approximation. With the solution we obtained the relaxation times of the system and analyzed the role of some parameters on the relaxation time of the system, mainly the surface viscosity. The results indicate that unders certain circunstances the surface viscosity is crucial to calculate the relaxation time of the system. The surface viscosity still have not been measured for the studied geometry, hence we hope that this work indicate possible ways where this parameter could be more easily obtained.

# Sumário

<b>Resumo</b>	<b>3</b>
<b>Abstract</b>	<b>4</b>
<b>Introdução</b>	<b>7</b>
<b>1 Classificação e Propriedades Físicas dos Cristais Líquidos</b>	<b>9</b>
1.1 Classificação . . . . .	10
1.2 Propriedades elásticas de cristais líquidos . . . . .	13
1.3 Energia de ancoramento . . . . .	15
1.4 Resposta elétrica . . . . .	15
1.4.1 Resposta elétrica a campo elétrico constante . . . . .	16
1.4.2 Resposta elétrica à diferença de potencial constante . . . . .	17
1.5 Propriedades óticas . . . . .	20
1.5.1 Transmitância ótica . . . . .	22
1.6 Viscosidade . . . . .	22
<b>2 Transições de Fréedericksz</b>	<b>25</b>
2.1 Estática . . . . .	25
2.1.1 Ancoramento forte . . . . .	25
2.1.2 Ancoramento fraco . . . . .	28
2.1.3 Ancoramento forte com <i>pretilt</i> . . . . .	30
2.2 Dinâmica . . . . .	32
2.2.1 Ancoramento forte . . . . .	32
2.2.2 Ancoramento fraco com <i>pretilt</i> . . . . .	33
2.2.3 Solução das equações . . . . .	35
2.3 Tempos característicos de relaxamento . . . . .	38
2.4 <i>Displays</i> . . . . .	39
<b>3 Formulação Numérica</b>	<b>41</b>
3.1 Diferenças finitas . . . . .	41
3.2 Encontrando a distribuição do diretor numericamente . . . . .	43
3.2.1 Testando o algoritmo . . . . .	46
3.3 Calculando a transmitância ótica e a diferença de fase . . . . .	48
3.3.1 Método de Jones . . . . .	49
3.3.2 Método de Jones em meios com parâmetros variáveis . . . . .	52
3.4 Calculando os tempos de resposta do sistema . . . . .	55

<b>4</b>	<b>Análise dos resultados</b>	<b>59</b>
4.1	Tempo de relaxamento do diretor $\tau_0$ . . . . .	59
4.1.1	Comportamento em relação à espessura e ao ancoramento . . . . .	59
4.1.2	Comportamento em relação ao <i>pretilt</i> . . . . .	66
4.1.3	Comportamento em relação à diferença de potencial . . . . .	69
4.2	Tempos óticos . . . . .	70
4.2.1	Comportamento em relação à espessura da célula . . . . .	70
4.2.2	Comportamento em relação ao <i>pretilt</i> . . . . .	73
4.2.3	Comportamento em relação à diferença de potencial . . . . .	76
4.3	Tempos de relaxação de fase . . . . .	78
4.3.1	Comportamento em relação à espessura e ao ancoramento . . . . .	78
4.3.2	Comportamento em relação ao <i>pretilt</i> . . . . .	80
4.3.3	Comportamento em relação à diferença de potencial . . . . .	82
	<b>Conclusões</b>	<b>86</b>
	<b>Apêndices</b>	<b>87</b>
<b>A</b>	<b>Algoritmos desenvolvidos</b>	<b>88</b>
A.1	Distribuição do diretor . . . . .	88
A.2	Tempos de relaxamento ótico . . . . .	93
A.3	Tempos de relaxamento do diretor e de fase . . . . .	94
	<b>Referências Bibliográficas</b>	<b>98</b>

# Introdução

Cristas líquidos são materiais que fluem, mas que apresentam algumas propriedades de sólidos, como a birrefringência ótica. O valor dessa birrefringência pode ser alterado por fatores externos, como campos elétricos e magnéticos.

Esta última propriedade, por sua vez, é chamada de birrefringência controlada. Devido a ela, os cristais líquidos tornaram-se materiais com uma grande quantidade de aplicações óticas, a de maior sucesso foi sua utilização em mostradores digitais (*displays*) [1, 2].

Para que um cristal líquido possa ser utilizado em um *display*, é necessário que ele possua um grupo de propriedades desejadas. Entre elas, é importante que o tempo de resposta em relação ao campo elétrico seja menor que a sensibilidade do olho humano (da ordem de milissegundos).

Os tempos de resposta são controlados por parâmetros do cristal líquido e das paredes que o confinam, dentre eles, podemos citar o ancoramento, a espessura da célula e a viscosidade do cristal líquido. Quando o ancoramento é do tipo fraco, também há necessidade de inclusão da viscosidade de superfície, como mostraremos neste trabalho.

Originada da interação entre o cristal líquido e o substrato confinador, a viscosidade de superfície governa a dinâmica de movimentos de moléculas próximas à interface. A forma de tratar o problema ainda é alvo de discussões. Na literatura, encontramos dois modos de abordá-lo.

No modelo deslocalizado, a viscosidade possui um valor na superfície que se aproxima continuamente do valor da viscosidade de volume conforme a distância em relação ao substrato aumenta [3–5].

No modelo localizado, proposto independentemente por Derzhanski e Petrov e por Kléman e Pickin [5], admite-se que a região de interface é tão pequena que a viscosidade de superfície varia descontinuamente do valor da superfície para o do volume [3, 6].

Neste trabalho, utilizaremos o modelo de viscosidade de superfície proposto por Derzhanski e Petrov para estudar como esse parâmetro influencia os tempos de relaxamento de um cristal líquido em uma célula na geometria de *slab*. Para tanto, dividimos o trabalho na seguinte sequência.

No capítulo 1, faremos uma breve introdução sobre as características das fases líquido-cristalinas e suas classificações. Em seguida, abordaremos as propriedades elásticas, elétricas e óticas desses materiais.

No capítulo 2, utilizaremos estes conceitos para o estudo analítico das transições de Fréederickz. Iniciaremos com o caso mais simples, em que o ancoramento na superfície é do tipo forte e não há *pretilt*. Em seguida, abordaremos casos mais complexos e, depois, abordaremos o caso mais geral, em que a célula é submetida a um ancoramento do tipo fraco na presença de *pretilt*, e considerando a viscosidade de superfície. Por fim, definiremos os tempos de relaxação e discutiremos brevemente o funcionamento de um *display*.

No capítulo 3, estudaremos numericamente o caso mais geral da transição de Frée-

drickzs. Além dos tempos de relaxamento do diretor, apresentaremos também neste capítulo, formas de obtermos os tempos de relaxamento ótico e de relaxamento de fase.

No capítulo 4, serão compararemos os resultados numéricos e os teóricos para os tempos de relaxamento do diretor. Em seguida, analisaremos o efeito da viscosidade de superfície nos tempos de relaxação.

Por fim, iremos sumarizar as conclusões dos estudos no capítulo seguinte. E, no apêndice A, iremos encontrar os algoritimos utilizados neste trabalho.

# Capítulo 1

## Classificação e Propriedades Físicas dos Cristais Líquidos

Usualmente, dividimos a matéria em três fases: sólida, líquida e gasosa. No entanto, existem substâncias que, em certas condições, apresentam características que podem pertencer a mais de uma fase. Quando isso ocorre, dizemos que essa substância se encontra em uma fase intermediária, chamada de mesofases. Os cristais líquidos são mesofases (há diversas fases de cristais líquidos) que geralmente se encontram entre a fase líquida-isotrópica e a fase sólida-cristalina. Trata-se de substâncias que fluem, mas que também apresentam algumas propriedades de sólidos cristalinos, como anisotropia elétrica e ordem orientacional.

O fato de um material possuir ordem orientacional implica existência de correlação na orientação entre seus elementos constituintes. Em um líquido, onde não há correlação, as moléculas são distribuídas aleatoriamente e são orientadas ao acaso (nenhuma ordem), mas, em um cristal líquido, os eixos longos de moléculas próximas tendem a se alinhar em uma direção comum [7]. Uma comparação entre as distribuições moleculares das fases sólida-cristalina, líquido-isotrópica e líquida-cristalina pode ser encontrada na figura 1.1

Os cristais líquidos são compostos de moléculas anisométricas, sendo o formato de bastão o mais famoso (chamado de calamítico). Também encontramos cristais líquidos com o formato de disco (chamados discóticos) e outras formas menos comuns, como o formato de banana.

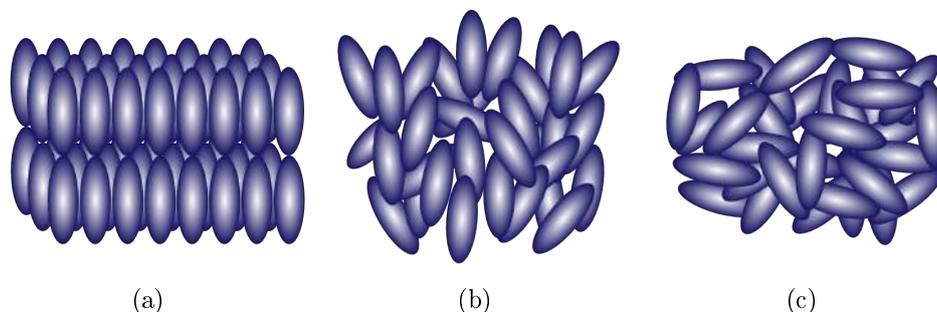


Figura 1.1: Representação da fase: a) Sólida-cristalina. b) Líquida-cristalina. c) Líquido-isotrópica.

## 1.1 Classificação

Podemos classificar as fases líquida-cristalinas em duas grandes categorias: liotrópicos e termotrópicos [8].

Cristais líquidos liotrópicos são formados por moléculas anfifílicas que, por sua vez, apresentam duas afinidades, uma parte hidrofílica e outra hidrofóbica. Dessa forma, dependendo da proporção com que essa substância é dissolvida em água, pode ocorrer a formação de aglomerados de moléculas denominados de micelas, que podem possuir comportamento líquido cristalino. Cristais líquidos liotrópicos podem ser facilmente encontrados no dia a dia, por exemplo, em detergentes ou sabões (ambos dissolvidos em água) e em vários sistemas biológicos [8].

Cristais líquidos termotrópicos são compostos de moléculas que possuem proporções características (eixo longo é cerca de 5 vezes maior que os demais eixos) [2]. Sua estrutura molecular é composta de uma parte rígida e de outra flexível, sendo que as duas são importantes para a formação da fase líquido-cristalina. A parte rígida favorece tanto a organização espacial quanto a orientacional, enquanto que a parte flexível não favorece nenhuma delas. Caso a molécula fosse composta apenas da parte rígida, ela passaria da fase cristalina diretamente para a líquido-isotrópica, e se ela fosse completamente flexível, não apresentaria ordem orientacional. O equilíbrio entre as duas características é o que torna possível a formação da fase [2].

Tanto cristais líquidos liotrópicos como termotrópicos apresentam diversas fases, que podem ser classificadas pela correlação posicional e orientacional, por exemplo. Dentro desses critérios, os cristais líquidos termotrópicos podem ser divididos em três grupos: nemático, esmétrico e colestérico.

**Nemáticos:** nos cristais líquidos nemáticos, os centros de massa das moléculas são distribuídos aleatoriamente (sem correlação), porém, as direções dos eixos longos são distribuídas preferencialmente em uma única direção. Essa fase é geralmente formada por moléculas alongadas no formato de bastão, mas também é possível encontrá-las em outros formatos, como pode ser visto na figura 1.2

Para descrever a correlação orientacional, é utilizado um vetor chamado de diretor, representado por  $\vec{n}$ . Em cristais líquidos calamíticos, ele representa a direção média do eixo longo molecular em uma região. Para os nemáticos discóticos, esse vetor representa a direção média dos vetores normais em relação ao plano que contém a molécula.

A fase nemática não apresenta polarização espontânea quando composta por moléculas

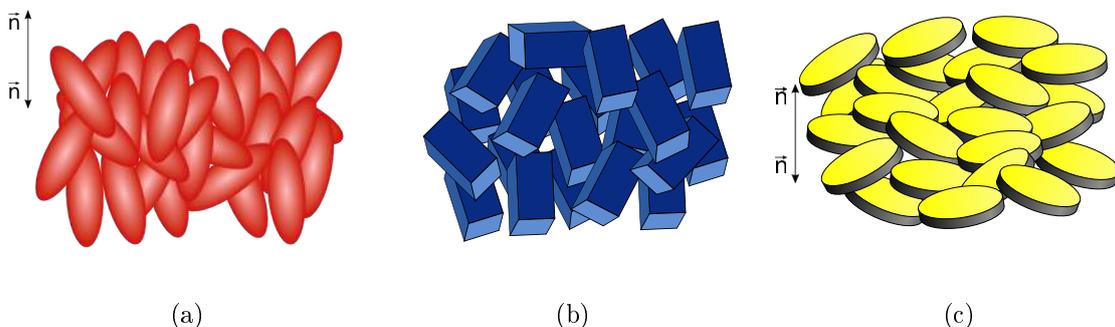


Figura 1.2: Representação da fase nemática: a) Calamítica uniaxial. b) Biaxial. c) Discótica.

no formato calamítico. Mesmo quando possuem momentos de dipolo permanente, as interações moleculares fazem com que as moléculas se organizem de modo que a polarização resultante seja nula. A partir disso, podemos afirmar que, para essa fase,  $\vec{n}$  e  $-\vec{n}$  são equivalentes [2].

Geralmente, moléculas que compõem a fase nemática possuem simetria axial, sendo necessário apenas um diretor para a sua caracterização. Muitas moléculas, todavia, não apresentam essa simetria, mas a velocidade com que elas executam rotações em torno do eixo longo (cerca de  $1\text{ GHz}$ ) faz com que elas se comportem como se a possuíssem [2]. Cristais líquidos compostos por esse tipo de moléculas são chamados de uniaxiais.

Para os cristais líquidos que não apresentam simetria uniaxial, é preciso dois diretores para caracterizar sua orientação média. Esse tipo de cristal líquido é chamado de biaxial. Esses últimos foram observados apenas entre cristais líquidos liotrópicos, a existência de cristais líquidos biaxiais termotrópicos ainda é objeto de discussões [9].

Para fazermos uma caracterização completa do cristal líquido nemático, precisamos introduzir outro parâmetro complementar ao diretor. Embora o diretor demonstre a orientação média em uma região, ele não fornece informação de quão bem orientado o cristal líquido se encontra, por exemplo: as figuras 1.3a e 1.3b mostram duas distribuições moleculares que possuem o mesmo diretor, mas elas apresentam estado de ordenamento distintos.

Para contornar esse problema, é definido um parâmetro de ordem escalar que indica o grau de orientação em que o meio se encontra. Uma primeira tentativa seria definir esse parâmetro como o valor médio do desvio dos eixos longos em relação ao diretor. Esse parâmetro poderia ser expresso pela média de um produto escalar entre o vetor  $\vec{a}$ , que representa a orientação de uma molécula, e o diretor  $\vec{n}$ , ilustrado na figura 1.4. Dessa forma, o valor do parâmetro seria 1 se o meio estivesse perfeitamente ordenado e 0 na fase isotrópica. Mas essa definição não leva em consideração a equivalência entre  $\vec{n}$  e  $-\vec{n}$ , a qual faria com que a média fosse sempre 0, independentemente do estado de orientação.

Uma forma mais conveniente consiste em definir o parâmetro como  $S = 1/2 \langle 3 \cos^2 \theta - 1 \rangle$ , em que  $\theta$  é o ângulo entre  $\vec{a}$  e  $\vec{n}$ . Nessa definição, o parâmetro  $S$  tem valor 1 quando o nemático está perfeitamente orientado e 0 na fase isotrópica. Podemos ainda, utilizar  $S$  e o diretor para definir um parâmetro que expresse todas as simetrias da fase. Isso é feito introduzindo um parâmetro tensorial  $Q$  cujas componentes possuem

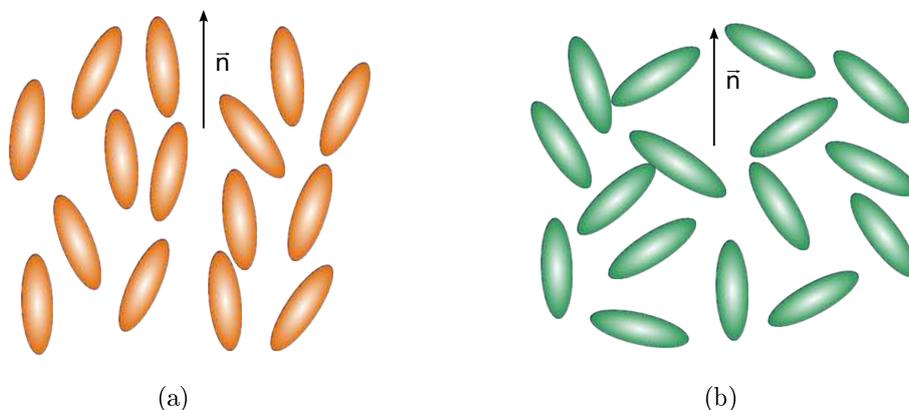


Figura 1.3: Representação de dois estados de ordenamento que apresentam a mesma direção média.

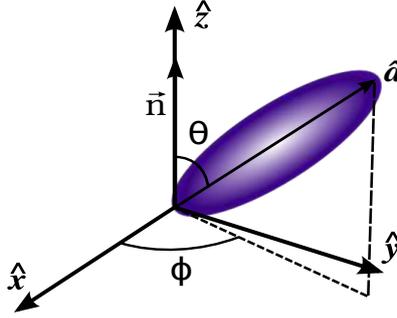


Figura 1.4: Representação dos ângulos entre uma molécula de cristal líquido e o diretor.

a forma [2]:

$$Q_{ij} = \frac{3}{2}S \left( n_i n_j - \frac{\delta_{ij}}{3} \right), \quad (1.1)$$

em que  $n_i$  e  $n_j$  são as componentes do diretor,  $S$  é o parâmetro de ordem escalar e  $\delta_{ij}$  é a delta de Kronecker.

**Esméticos:** Algumas fases de cristais líquidos, além de apresentar correlação orientacional, também apresentam certa ordem posicional. Esse é o caso da fase esmética, encontrada entre a fase sólido-cristalina e a nemática. Nessa mesofase, os cristais líquidos são organizados em camadas, cujas distâncias são fixas e há várias formas de organização entre as camadas e os diretores, sendo que cada tipo de organização caracteriza uma fase esmética diferente.

As fases esméticas mais conhecidas são a Esmética A e a Esmética C. Em ambas, os componentes presentes na mesma camada apresentam forte ordem orientacional e as duas mesofases se diferem pela direção do diretor em relação às camadas. Na fase A, o diretor se encontra normal a ela, enquanto que, na fase C, ele se encontra inclinado. Essas duas fases podem ser vistas na figura 1.5.

**Colestéricos:** Podemos encontrar na natureza cristais líquidos nemáticos com uma propriedade a mais, a quiralidade. Cristais líquidos nemáticos quirais são chamados de colestéricos. A quiralidade faz com que o diretor de um nemático sofra uma leve torção

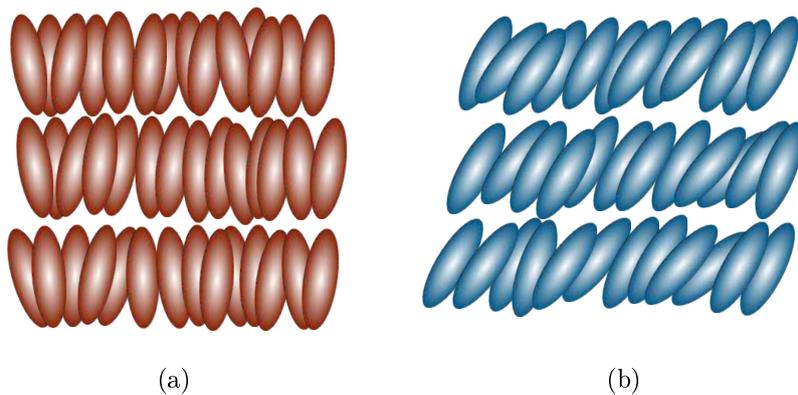


Figura 1.5: Representação das fases: a) Esmética A. b) Esmética C.

entre um plano e outro, resultando em uma estrutura helicoidal. Essa estrutura executa uma torção de  $360^\circ$  e o espaço necessário para tanto é chamado de passo ( $p$ ). Podemos ver uma representação esquemática da fase na figura 1.6.

Existem basicamente duas formas de obtermos um colestérico: uma é encontrar cristais líquidos nemáticos intrinsecamente quirais; a outra consiste em adicionar um dopante quiral a um nemático. Em termos práticos, a segunda forma é mais útil que a primeira, pois podemos controlar o passo por meio da concentração do dopante [8].

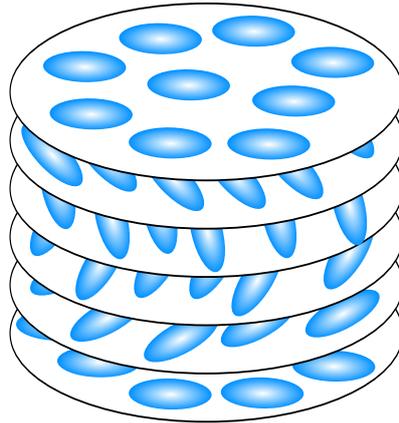


Figura 1.6: Representação de um colestérico.

## 1.2 Propriedades elásticas de cristais líquidos

O problema em determinar a distribuição de direção média das moléculas em cristais líquidos é usualmente abordado de duas formas: uma consiste em analisar macroscopicamente o comportamento coletivo do sistema; a outra consiste em descrever o sistema por meio das propriedades moleculares individuais.

A abordagem macroscópica é geralmente feita por modelos fenomenológicos. Nela, propriedades do sistema são obtidas por meio de aproximações de funções com propriedades características da fase, com algumas constantes que são ajustadas experimentalmente. Um exemplo importante é a teoria elástica do contínuo, cujo método tem obtido bons resultados, especialmente para problemas de volume [10–13]. Nessa abordagem, é comum encontrar equações que não possuem soluções analíticas, mas, muitas vezes, é possível resolvê-las utilizando métodos numéricos usuais, como diferenças finitas e elementos finitos [14–17].

A teoria elástica do contínuo é geralmente utilizada para descrever a distribuição do diretor em cristais líquidos. Para tanto, é preciso admitir duas hipóteses: primeiro, é preciso admitir que o diretor do cristal líquido possa ser definido em um volume infinitesimal, de forma que o diretor varie continuamente no espaço. É preciso que esse volume seja grande o suficiente para que englobe várias moléculas, mantendo o sentido de direção média do diretor (chamada de aproximação mesoscópica).

A segunda hipótese a ser assumida é que as variações que possam ocorrer no diretor ao longo do cristal líquido sejam muito suaves, de forma que variações significativas no diretor aconteçam em distâncias de ordem muito maiores que as distâncias moleculares.

Essas duas hipóteses em conjunto permitem tratar o sistema líquido cristalino como um meio elástico, associando uma densidade de energia nas variações do diretor ao longo do espaço. Essas variações podem ser expressas por meio de derivadas espaciais e, como as variações são suaves (segunda hipótese), podemos supor, ainda, que a densidade de energia dependa apenas da derivada de primeira ordem. Dessa forma, mesmo que não seja conhecida a forma da função densidade de energia, podemos desenvolvê-la em série de Taylor e determinar experimentalmente as constantes envolvidas. Fazendo isso, obtemos a famosa energia livre de Frank:

$$f_{frank} = \frac{1}{2}K_{11}(\nabla \cdot \vec{n})^2 + \frac{1}{2}K_{22}(\vec{n} \cdot \nabla \times \vec{n})^2 + \frac{1}{2}K_{33}(\vec{n} \times \nabla \times \vec{n})^2, \quad (1.2)$$

em que  $\vec{n}$  é o diretor e  $K_{11}$ ,  $K_{22}$  e  $K_{33}$  são constantes elásticas, determinadas experimentalmente.

Cada constante elástica está associada a um tipo de distorção do diretor de um nemático. A constante  $K_{11}$  está relacionada a deformações de divergência,  $K_{22}$  a deformações do tipo torção e  $K_{33}$  a deformações do tipo flexão. Devido à forma dessas deformações, as constantes  $K_{11}$ ,  $K_{22}$  e  $K_{33}$  recebem o nome de constante de *Splay*, *Twist* e *Bend*, respectivamente. As formas das distorções podem ser visualizadas na figura 1.7. Em um cristal líquido nemático, essas são as três formas básicas de distorções possíveis. Todas as demais formas podem ser obtidas como uma combinação delas.

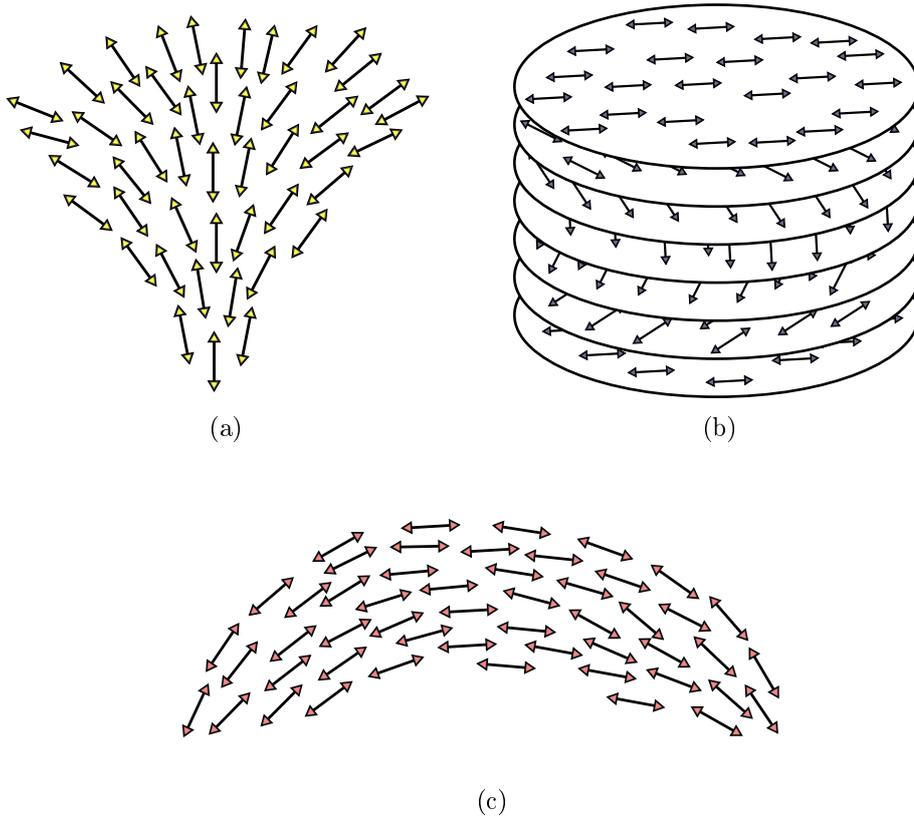


Figura 1.7: Tipos de distorções relacionados à constante: a)  $K_{11}$ (*Splay*). b)  $K_{22}$ (*Twist*). c)  $K_{33}$ (*Bend*).

### 1.3 Energia de ancoramento

Em situações de interesse, podemos encontrar cristais líquidos confinados por superfícies de outros materiais, como por exemplo, dois substratos de vidro. A interação entre o cristal líquido e a superfície pode alterar a energia de superfície do sistema. Por exemplo, na fabricação de um *display*, é inserida uma quantidade de cristal líquido entre dois substratos de vidro. As moléculas próximas à superfície irão interagir com a parede do substrato de forma diferente de como elas interagem com as moléculas no interior da célula, resultando, assim, em uma densidade de energia superficial, a que chamamos de energia de ancoramento.

Embora tenha sido descoberta há mais de trinta anos, a natureza específica da energia de ancoramento ainda é incerta. Sabemos que ela está ligada a fenômenos que ocorrem na interface entre o cristal líquido e uma superfície, mas há experimentos que mostraram que a energia de ancoramento pode depender da espessura da célula. Atualmente, possuímos bons modelos fenomenológicos para descrever a energia de ancoramento, contudo, sua natureza continua sendo objeto de investigação [18].

Uma característica importante da energia de ancoramento é sua dependência com a orientação do diretor próximo à interface. Enquanto que uma interface entre uma superfície sólida e um líquido isotrópico é basicamente descrita pela tensão superficial (em um modelo fenomenológico), para um líquido anisotrópico, essa tensão muda conforme a orientação das moléculas. A direção preferencial induzida pela superfície é chamada de eixo fácil. Quando um cristal líquido é orientado na direção desse eixo, a energia de superfície é mínima.

Um dos modelos bastante utilizado para descrever a energia de ancoramento foi desenvolvido por Rapini-Papoular [19]. Nele, a densidade de energia superficial também é obtida fenomenologicamente, cuja expressão é:

$$f_s = \frac{1}{2}W_a \text{sen}^2(\phi - \phi_s) + \frac{1}{2}W_p \text{sen}^2(\theta - \theta_s). \quad (1.3)$$

Nessa expressão,  $W_a$  e  $W_p$  são as energias de ancoramento azimutal e polar;  $\theta_s$  e  $\phi_s$ , os ângulos polar e azimutal eixo fácil; e  $\theta$  e  $\phi$ , ângulos do diretor. As constantes  $W_p$ ,  $W_a$ ,  $\theta_s$  e  $\phi_s$  são determinadas experimentalmente.

Fisicamente, interpretamos as constantes  $W_a$  e  $W_p$  como a representação da intensidade do ancoramento. Quanto maiores forem essas constantes, mais energia será necessário para desviar o diretor do eixo fácil. Valores típicos para essas constantes variam entre  $10^{-6} \text{J}/m^2$  e  $10^{-3} \text{J}/m^2$ . Quando a intensidade do ancoramento é da ordem de  $10^{-3} \text{J}/m^2$ , é necessária uma grande quantidade de energia para retirar o diretor do eixo fácil. Nessa situação, dizemos que o ancoramento é do tipo forte e, para valores de ordens mais baixas, que o ancoramento é do tipo fraco.

### 1.4 Resposta elétrica

Cristais líquidos são materiais que não apresentam polarização espontânea. Embora suas moléculas geralmente apresentem dipolos elétricos intrínsecos, a fase se organiza de forma a não apresentar momento de dipolo [8]. Entretanto, a presença de um campo elétrico pode orientar os dipolos moleculares e provocar a separação de carga, polarizando o meio.

Devido à anisotropia dielétrica do sistema, o campo elétrico pode variar no interior do cristal líquido. Para quantificar a resposta do meio a campos elétricos, precisamos saber qual o tipo de regime a que o processo é submetido. Iremos abordar dois regimes de resposta elétrica: o primeiro acontece quando o campo elétrico induz pequenas variações no diretor e o campo elétrico pode ser considerado constante em todo o meio; no segundo, regime iremos considerar que a diferença de potencial nos substratos é constante. Esse regime é obtido quando todo processo ocorre conectado a uma bateria que mantém constante a voltagem no sistema.

### 1.4.1 Resposta elétrica a campo elétrico constante

Em meios isotrópicos, a polarização para campos pequenos pode ser aproximada por  $\vec{P} = \epsilon_0 \chi \vec{E}$ , sendo  $\chi$  a permissividade dielétrica do meio e  $\vec{P}$  a polarização por unidade de volume.

Para meios anisotrópicos, a resposta elétrica depende da direção do campo aplicado. Em cristais líquidos, ela depende da direção relativa entre o diretor e o campo elétrico. Portanto, para obtermos a polarização em cristais líquidos, é preciso reescrever a equação da polarização para meios isotrópicos de uma forma consistente com as propriedades do meio. Isso pode ser feito substituindo a constante de permissividade dielétrica ( $\chi$ ) por um tensor ( $\chi$ ), cujas componentes dependam do diretor e do sistema de referência.

Para cristais líquidos uniaxiais, a polarização pode ser escrita de forma mais conveniente. A simetria axial do meio faz com que seja possível substituir o tensor  $\vec{\chi}$  por duas constantes de suscetibilidade, uma perpendicular e outra paralela ao diretor. Assim, é possível decompor o campo elétrico nessas direções, tal como ilustra a figura 1.8, e escrever as componentes da polarização como:

$$\begin{aligned} \vec{P}_{\parallel} &= \epsilon_0 \chi_{\parallel} (\vec{n} \cdot \vec{E}) \vec{n}, \\ &e \\ \vec{P}_{\perp} &= \chi_{\perp} [\vec{E} - (\vec{n} \cdot \vec{E}) \vec{n}]. \end{aligned} \tag{1.4}$$

Ou na forma geral:

$$\vec{P} = \epsilon_0 \{ \chi_{\parallel} (\vec{n} \cdot \vec{E}) \vec{n} + \chi_{\perp} [\vec{E} - (\vec{n} \cdot \vec{E}) \vec{n}] \}, \tag{1.5}$$

em que  $\chi_{\parallel}$  e  $\chi_{\perp}$  são as constantes de permissividade paralela e perpendicular ao diretor, respectivamente.

Podemos, também, escrever a polarização em termos das constantes dielétricas do meio. Elas podem ser obtidas através das constantes de suscetibilidade elétrica pela relação  $\epsilon_{\perp} = \chi_{\perp} + 1$  e  $\epsilon_{\parallel} = \chi_{\parallel} + 1$ , em que  $\epsilon_{\perp}$  e  $\epsilon_{\parallel}$  são respectivamente as constantes dielétricas perpendicular e paralela ao diretor [9]. Dessas relações, podemos concluir que

$$\Delta\chi = \Delta\epsilon, \tag{1.6}$$

em que  $\Delta\epsilon = \epsilon_{\parallel} - \epsilon_{\perp}$  é chamada de constante de anisotropia dielétrica.

Substituindo a equação (1.6) na equação (1.5), obtemos

$$\vec{P} = \epsilon_0 [\chi_{\perp} \vec{E} + \Delta\epsilon (\vec{E} \cdot \vec{n}) \vec{n}]. \tag{1.7}$$

No processo de polarização, ocorre transferência de energia entre o campo elétrico e o meio que está sendo polarizado. Quando a aplicação do campo induz pequenas variações

no diretor, o campo elétrico  $E$  pode ser considerado constante no interior do material. Dessa forma, a densidade de energia dielétrica é obtida por [20]

$$f_e = -\frac{1}{2}\vec{E} \cdot \vec{P}. \quad (1.8)$$

Por fim, substituindo (1.7) em (1.8), obtemos:

$$f_e = -\frac{1}{2}\epsilon_0[\chi_\perp|E|^2 + \Delta\epsilon(\vec{E} \cdot \vec{n})^2]. \quad (1.9)$$

O primeiro termo da equação é independente da orientação do diretor, ele pode ser descartado quando apenas a interação entre o campo elétrico e o cristal líquido for necessária. Nessas situações, teremos

$$f_e = -\frac{1}{2}\epsilon_0\Delta\epsilon(\vec{E} \cdot \vec{n})^2. \quad (1.10)$$

Observando a equação (1.10), podemos constatar que a constante de anisotropia dielétrica exerce um importante papel na orientação de cristais líquidos. A orientação relativa dos diretores em relação ao campo elétrico depende do sinal dessa constante: quando ela é positiva, o mínimo de energia elétrica é atingido quando o diretor está orientado paralelo ao campo elétrico; caso ela possua um valor negativo, o mínimo de energia elétrica é obtido quando o diretor está orientado perpendicularmente ao campo elétrico.

### 1.4.2 Resposta elétrica à diferença de potencial constante

Caso a variação do diretor seja expressiva, precisamos considerar a variação do campo elétrico no interior da amostra e o regime a que é submetido o campo elétrico no sistema.

Consideraremos agora que o campo elétrico é aplicado a uma diferença de potencial constante. Durante o processo, uma quantidade de trabalho  $W_e$  pode ser realizada pela bateria para manter o sistema a uma diferença de potencial constante. Se o processo for realizado a temperatura e pressão constantes, o estado final será dado pelo mínimo da energia de Gibbs do sistema. Incluindo o trabalho realizado pela bateria, o sistema encontra o equilíbrio no estado que minimiza o funcional [2]

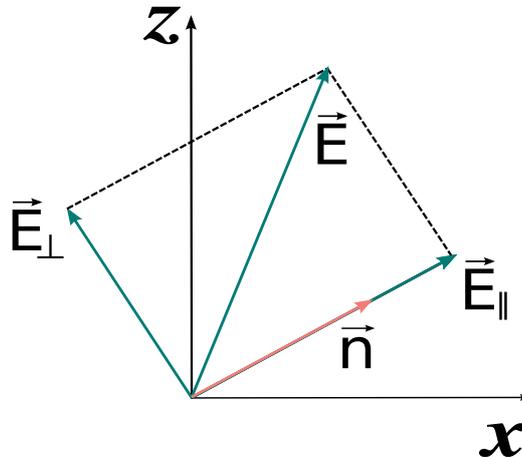


Figura 1.8: Componentes do vetor de polarização.

$$\delta(G - W_e) > 0. \quad (1.11)$$

em que a energia livre de Gibbs é dada pelas energias elástica e dielétrica do meio.

Sabemos que a energia elástica é dada pela energia de Frank, resta-nos encontrar a densidade de energia dielétrica e o trabalho elétrico realizado pela fonte externa. Para tanto, consideramos uma amostra de cristal líquido disposto em uma célula na geometria de *slab*. Conectamos a ela uma bateria que mantém o substrato inferior com o potencial  $\phi_1$  e o substrato superior com potencial  $\phi_2$ , de forma que  $\phi_1 > \phi_2$  e  $\Delta\phi > 0$ .

Durante o processo de reorientação do diretor, uma quantidade de carga  $dQ$  se movimenta da placa superior de área  $A_2$  à inferior de área  $A_1$  para manter a diferença de potencial constante durante o processo. O trabalho  $dW_e$  realizado pela bateria para movimentar essas cargas é dado por

$$dW_e = (\phi_1 - \phi_2)dQ. \quad (1.12)$$

A variação de carga pode ser expressa pela variação da densidade de carga na placa superior  $\sigma_2$  por  $dQ = \int_{A_2} (-\delta\sigma_2)dA_2$ . Pela conservação de carga, a mesma variação de carga pode ser expressa em termos da densidade de carga na placa inferior  $\sigma_1$  por  $dQ = \int_{A_1} \delta\sigma_1 dA_1$ . Substituindo essas definições em (1.12), obtemos

$$dW_e = \int_{A_1} \phi_1 \delta\sigma_1 dA + \int_{A_2} \phi_2 \delta\sigma_2 dA. \quad (1.13)$$

Com essa expressão, temos o trabalho realizado sobre o sistema em função da variação da densidade de carga sobre as superfícies dos substratos. Agora, é preciso encontrar a densidade de energia dielétrica do meio. A energia dielétrica  $U_e$  de um meio dielétrico é dado pela equação [20]

$$U_e = \int_V \frac{1}{2} \vec{E} \cdot \vec{D} dV, \quad (1.14)$$

sendo  $\vec{D}$  o vetor deslocamento elétrico e  $V$  o volume do sistema.

Sabemos que  $\vec{E} = -\vec{\nabla}\phi$  e, portanto,  $\vec{E} \cdot \vec{D} = -\vec{\nabla}\phi \cdot \vec{D}$ . Utilizando a identidade  $\vec{\nabla} \cdot (\phi\vec{D}) = \vec{\nabla}\phi \cdot \vec{D} + \phi\vec{\nabla} \cdot \vec{D}$ , temos que  $\vec{E} \cdot \vec{D} = \phi\vec{\nabla} \cdot \vec{D} - \vec{\nabla} \cdot (\phi\vec{D})$ . Em um meio onde não há carga líquida, o vetor deslocamento é determinado pela equação  $\vec{\nabla} \cdot \vec{D} = 0$ . Substituindo essas relações em (1.14), obtemos

$$U_e = \frac{1}{2} \int_V -\vec{\nabla} \cdot (\phi\vec{D}) dV. \quad (1.15)$$

Pelo teorema da divergência, podemos transformar a integral volumétrica da equação (1.15) em uma integral sobre as superfícies  $A$  na forma

$$U_e = -\frac{1}{2} \oint_A \phi\vec{D}d\vec{A}. \quad (1.16)$$

Esta última pode ser aberta em duas integrais de superfície: uma sobre a superfície  $A_1$ , cujo vetor normal é antiparalelo a  $\vec{D}$ ; e a outra sobre a superfície  $A_2$ , cujo vetor normal é paralelo a  $\vec{D}$ . A parede superior é mantida a um potencial  $\phi = \phi_2$  e a inferior a um potencial  $\phi = \phi_1$ . Substituindo essas relações em (1.16), obtemos

$$U_e = \frac{1}{2} \int_{A_1} \phi_1 D_z \Big|_{z=0} dA_1 - \frac{1}{2} \int_{A_2} \phi_2 D_z \Big|_{z=d} dA_2. \quad (1.17)$$

Nas superfícies, o vetor deslocamento elétrico  $\vec{D}$  é determinado pelas condições de contorno  $D_z(z=0) = \sigma_1$  e  $D_z(z=d) = -\sigma_2$ . Aplicando as condições de contorno em (1.17), obtemos

$$U_e = \frac{1}{2} \int_{A_1} \phi_1 \sigma_1 dA + \frac{1}{2} \int_{A_2} \phi_2 \sigma_2 dA. \quad (1.18)$$

Na equação, (1.18) temos a energia dielétrica do sistema em função das densidades de carga, superficiais. A variação de densidade de energia dielétrica  $\delta U_e$  será, portanto,

$$\delta U_e = \delta \left[ \frac{1}{2} \int_{A_1} \phi_1 \sigma_1 dA + \frac{1}{2} \int_{A_2} \phi_2 \sigma_2 dA \right] = \frac{1}{2} \int_{A_1} \phi_1 \delta \sigma_1 dA + \frac{1}{2} \int_{A_2} \phi_2 \delta \sigma_2 dA. \quad (1.19)$$

Comparando as equações (1.19) e (1.13), podemos concluir que

$$dW_e = \delta \int_V \vec{E} \cdot \vec{D} dV. \quad (1.20)$$

Nessa forma, a densidade de energia dielétrica e o trabalho estão expressos nas mesmas variáveis. O estado de equilíbrio do sistema será aquele que minimizar o funcional

$$G - W_e = \int_V (f_{frank} + \frac{1}{2} \vec{E} \cdot \vec{D} - \vec{E} \cdot \vec{D}) dV = \int_V (f_{frank} - \frac{1}{2} \vec{E} \cdot \vec{D}) dV. \quad (1.21)$$

Por fim, precisamos encontrar a dependência dos vetores  $\vec{E}$  e  $\vec{D}$  com os parâmetros do cristal líquido. O vetor deslocamento elétrico pode ser obtido pela relação [20]

$$\vec{D} = \epsilon_0 \vec{E} + \vec{P}. \quad (1.22)$$

O vetor de polarização já foi obtido na seção anterior e é dado pela equação (1.7). Substituindo essa equação em (1.22), obtemos

$$\vec{D} = \epsilon_0 (\epsilon_{\perp} \vec{E} + \Delta \epsilon E \cos \theta \vec{n}) \quad (1.23)$$

Considerando que o meio líquido-cristalino possui carga líquida nula, podemos utilizar novamente a equação de Maxwell  $\nabla \cdot D = 0$ , cuja solução é  $D_z = \text{constante}$ . As condições de contorno  $D_z(z=0) = \sigma_1 = \sigma$  e  $D_z(z=d) = -\sigma_2 = \sigma$  implicam

$$D_z = \sigma. \quad (1.24)$$

O campo elétrico só possui componente na direção  $z$ , dada por  $E$ . Aplicando essas relações em (1.23), obtemos

$$\sigma = \epsilon_0 (\epsilon_{\perp} E + \Delta \epsilon E \cos^2 \theta). \quad (1.25)$$

Após alguma álgebra, obtemos a expressão para o campo elétrico

$$E = \frac{\sigma}{\epsilon_0 (\epsilon_{\perp} + \Delta \epsilon \cos^2 \theta)}. \quad (1.26)$$

Enfim, a energia elétrica pode ser obtida substituindo as equações (1.24) e (1.26) em (1.14) para obtermos

$$f_{\text{elétrica}} = \int_0^d \frac{\sigma^2}{\epsilon_0(\epsilon_{\perp} + \Delta\epsilon \cos^2 \theta)} dz. \quad (1.27)$$

Durante o processo,  $\sigma$  não é uma constante. Como a voltagem sobre o *slab* é mantida constante durante o processo, o valor de  $\sigma$  é dado pela equação de vínculo

$$\phi_1 - \phi_2 = \int_0^d E_z dz = \int_0^d \frac{\sigma}{\epsilon_0(\epsilon_{\perp} + \Delta\epsilon \cos^2 \theta)} dz. \quad (1.28)$$

## 1.5 Propriedades óticas

As simetrias presentes na fase líquido-cristalina produzem diversas propriedades interessantes, sendo as óticas provavelmente as mais importantes do ponto de vista industrial. Como cada fase líquido-cristalina tem uma organização característica, cada uma apresenta propriedades óticas distintas. Conforme feito até aqui, focaremos nas propriedades óticas de cristais líquidos nemáticos uniaxiais, cuja principal característica ótica é apresentar birrefringência.

Um material birrefringente possui dois índices de refração, um perpendicular e outro paralelo ao eixo ótico<sup>1</sup>, chamados de índice de refração ordinário ( $n_o$ ) e índice de refração extraordinário ( $n_e$ ), respectivamente. Em cristais líquidos uniaxiais, o eixo ótico é paralelo ou perpendicular ao diretor dependendo de qual dos índices for maior. Os índices de refração são relacionados às constantes dielétricas por [9]:

$$\begin{aligned} n_o &= \sqrt{\epsilon_{\perp}} \\ n_e &= \sqrt{\epsilon_{\parallel}}. \end{aligned} \quad (1.29)$$

Em um meio isotrópico, uma onda luminosa linearmente polarizada se propaga com uma velocidade  $v = c/n$ , sendo  $n$  o índice de refração do material e  $c$  a velocidade da luz no vácuo. Em um meio birrefringente, a presença de dois índices de refração faz com que ela possa ser decomposta em duas ondas.

Utilizando as equações de Maxwell, é possível obtermos as propriedades de ambas as ondas. Elas se propagam na mesma direção da onda inicial e são linearmente polarizadas, mas suas direções de polarização são diferentes. Devido a isso, cada onda se propaga sob a influência de um índice de refração diferente.

Uma das ondas, chamada de *o-wave*, possui polarização perpendicular à direção de propagação e ao eixo ótico [2], conforme ilustra a figura 1.9. Dessa forma, ela se propaga sob a influência do índice de refração  $n_o$  e, portanto, com velocidade  $v = c/n_o$ .

A segunda onda, chamada de extraordinário ou *e-wave*, possui direção de polarização que se encontra no plano que contem a direção de propagação da onda inicial e o eixo ótico. Ela faz um ângulo de  $90^\circ$  com a polarização da onda ordinária, mas em geral, ela não é perpendicular à direção de propagação da onda inicial [2], como ilustra a figura 1.9.

Esta onda se propaga sobre a influência de uma combinação entre os índices de refração ordinário e extraordinário, que chamaremos de índice de refração efetivo ( $n_{ef}$ ). O valor desse índice pode ser encontrado por meio da equação

$$n_{ef} = \frac{n_o n_e}{\sqrt{n_e^2 \cos^2 \theta + n_o^2 \sin^2 \theta}}, \quad (1.30)$$

---

<sup>1</sup>Eixo ótico é a direção em que a luz se propaga no material sem ter seu estado de polarização alterado.

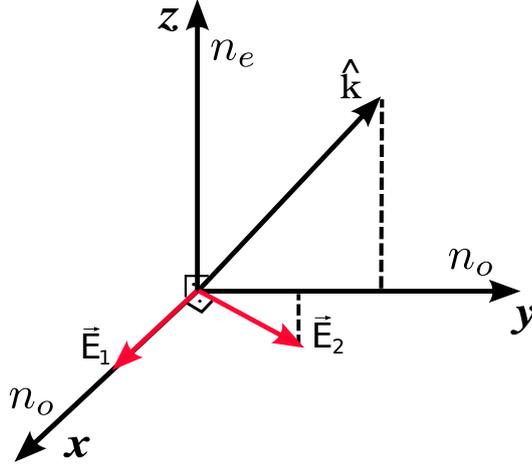


Figura 1.9: Representação da direção de propagação e de polarização das ondas ordinárias e extraordinárias.  $\hat{k}$  é a direção de propagação da onda inicial,  $\vec{E}_1$  é o campo elétrico da onda ordinária e  $\vec{E}_2$  é o campo elétrico da onda extraordinária. Observe que  $\hat{k} \perp \vec{E}_1$ ,  $\vec{E}_1 \perp \vec{E}_2$ , mas  $\hat{k} \not\perp \vec{E}_2$ .

em que  $\theta$  é o valor do ângulo entre o eixo ótico e a direção de propagação da onda. Com o valor do índice de refração, encontramos a velocidade da onda extraordinária pela equação  $v = c/n_{ef}$ .

Analisando a equação (1.30), podemos destacar a seguinte situação. Quando  $\theta = 0$ , ou seja, quando a direção de propagação da onda luminosa é paralela ao eixo ótico, temos que  $n_{ef} = n_o$ , que é o mesmo índice de refração da onda ordinária. Nessa situação, as duas ondas se propagam com a mesma velocidade e são indistinguíveis.

No restante das situações teremos:  $n_{ef} = n_e$ , quando a direção de propagação for perpendicular ao eixo ótico; e um valor entre  $n_e$  e  $n_o$ , quando  $0 < \theta < 90^\circ$ . Notamos, porém, que os valores extremos são  $n_e$  e  $n_o$ : quando  $n_e > n_o$ , o material é classificado como uniaxial positivo; quando  $n_e < n_o$ , é classificado como uniaxial negativo [21].

Ao saírem do meio birrefringente, as ondas ordinárias e extraordinárias são recombinadas formando uma única onda novamente. Em geral, elas propagam velocidades diferentes. Assim, quando se recombinam, elas apresentam as mesmas propriedades da onda inicial com exceção de uma diferença de fase  $\delta$  na polarização. Essa diferença pode ser calculada pela relação

$$\delta = \frac{2\pi}{\lambda}(n_{ef} - n_o) = \frac{2\pi}{\lambda} \left( \frac{n_o n_e}{\sqrt{n_e^2 \cos^2 \theta + n_o^2 \sin^2 \theta}} - n_o \right), \quad (1.31)$$

sendo  $\lambda$  o comprimento de onda e  $d$  a espessura do meio.

Para casos em que o ângulo do diretor é variável durante o percurso (como em uma célula deformada), a diferença de fase pode ser obtida pela relação

$$\delta = \int_0^d \frac{2\pi}{\lambda} (n_{ef} - n_o) dz = \int_0^d \frac{2\pi}{\lambda} \left( \frac{n_o n_e}{\sqrt{n_e^2 \cos^2 \theta + n_o^2 \sin^2 \theta}} - n_o \right) dz. \quad (1.32)$$

### 1.5.1 Transmitância ótica

Uma das formas de visualizarmos a presença da diferença de fase da luz ao atravessar um meio líquido cristalino é fazendo uso da célula de polarizadores. Nela acoplamos dois polarizadores a uma célula de cristal líquido: um polarizador é posicionado antes do primeiro substrato e o segundo, depois do outro substrato. Em geral, os polarizadores estão cruzados.

Ao incidir um feixe de luz sobre o sistema, o feixe irá adquirir um estado de polarização definido pelo primeiro polarizador. Depois, o feixe atravessa a amostra de cristal líquido, onde seu estado de polarização pode variar dependendo da orientação do diretor. Ao atravessar o segundo polarizador, parte do feixe é absorvido, dependendo da polarização adquirida anteriormente.

A fração da luz que atravessa a célula é definida como transmitância ótica. A equação para o cálculo dela varia conforme os parâmetros da célula utilizada. Para uma célula de cristal líquido nemático uniformemente orientada, que será estudada mais adiante, a transmitância ótica é dada pela relação

$$I = I_0 \sin^2(2\beta) \sin^2\left(\frac{\delta}{2}\right), \quad (1.33)$$

em que  $I_0$  é a intensidade do feixe incidente e  $\beta$  é o ângulo formado entre a projeção  $x - y$  do diretor e a direção de polarização.

Nos casos que iremos abordar neste trabalho, o diretor ficará contido no plano  $x - z$ , portanto, o ângulo  $\beta$  do diretor ficará fixo durante todo o processo. O valor de  $\beta$  será dado pela orientação do eixo fácil no substrato. Escolheremos  $\beta = 45^\circ$  e incidência inicial como sendo 1 para termos a transmitância normalizada a unidade. Tomando esses valores, a transmitância é dada por [19]

$$I = \sin^2\left(\frac{\delta}{2}\right). \quad (1.34)$$

## 1.6 Viscosidade

Líquidos são substâncias muito sensíveis a tensões de cisalhamento: ao serem submetidos a esse tipo de tensão, eles podem escoar. A viscosidade de um fluido pode ser entendida como a sua resistência ao escoamento quando submetido a uma tensão de cisalhamento. A intensidade da viscosidade está relacionada com as interações moleculares dos constituintes do líquido [22].

Devido à anisotropia das interações moleculares, cristas líquidos apresentam diferentes viscosidades dependendo da orientação relativa do diretor ao gradiente de velocidade do fluido. A teoria utilizada para descrever esse fenômeno foi desenvolvida por Ericksen, Leslie e Parodi, comumente chamada de ELP [22].

Assim como a teoria de Frank, essa é uma teoria fenomenológica em que o tensor de estresse é desenvolvido em uma combinação entre as componentes do diretor e os gradientes de velocidade do fluido. Utilizando as simetrias da fase nemática, o tensor pode ser simplificado para [22]

$$\sigma_{\alpha\beta} = \alpha_1 n_\alpha n_\beta n_\gamma n_\delta A_{\gamma\delta} + \alpha_2 n_\alpha N_\beta + \alpha_3 n_\beta N_\alpha + \alpha_4 A_{\alpha\beta} + \alpha_5 n_\alpha n_\mu A_{\mu\beta} + \alpha_6 n_\beta n_\mu A_{\mu\alpha}, \quad (1.35)$$

em que  $\alpha_i$  com ( $i = 1 \rightarrow 6$ ) são as constantes fenomenológicas obtidas no modelo,  $A_{ij}$  é o tensor gradiente de velocidades simétricas dado por

$$A_{ij} = \frac{1}{2} \left( \frac{\partial v_i}{\partial x_j} + \frac{\partial v_j}{\partial x_i} \right), \quad (1.36)$$

e  $\vec{N}$  é a rotação do diretor em relação ao meio, cuja forma é

$$\vec{N} = \frac{\partial \vec{n}}{\partial t} - \vec{\omega} \times \vec{n}, \quad (1.37)$$

aqui  $\omega$  é a velocidade angular total do líquido.

Como é notável na equação (1.35), há 6 constantes fenomenológicas denominadas coeficientes de Leslie. Posteriormente, foi demonstrado por Parodi que

$$\alpha_2 + \alpha_3 = \alpha_6 - \alpha_5, \quad (1.38)$$

restando, no total, cinco constantes independentes.

Experimentalmente, as viscosidades não são medidas na forma como aparecem no tensor de estresse. As medidas são feitas em geometrias em que a viscosidade efetiva é dada pela combinação de algumas constantes de Leslie e, então, essas constantes podem ser comparadas às constantes de Leslie para determinar seu valor. As primeiras medidas foram realizadas por Miesowicz e, por essa razão, as constantes carregam seu nome.

Miesowicz estudou as constantes de viscosidade quando o diretor estava paralelo ou perpendicular ao gradiente de velocidade no fluido. Para realizar essas medidas, ele fixava o diretor utilizando um campo magnético da ordem de  $1T$  para, então, provocar o escoamento do fluido. As três geometrias estudadas por Miesowicz podem ser visualizadas na figura 1.10. As velocidades foram posicionadas no mesmo plano para facilitar a visualização. As constantes de Miesowicz se relacionam com os coeficientes de Leslie pelas relações

$$\begin{aligned} \eta_1 &= \frac{1}{2} \alpha_4 \\ \eta_2 &= (\alpha_3 + \alpha_4 + \alpha_6) \\ \eta_3 &= -\alpha_2 + \alpha_4 + \alpha_5. \end{aligned} \quad (1.39)$$

É notável que, em nenhuma das relações, foi mencionado o coeficiente de Leslie  $\alpha_1$ . Essa constante só aparece quando há um ângulo entre o diretor e o gradiente de velocidade.

O campo magnético é importante nessas medidas não apenas para alinhar o diretor na direção desejada, mas também para manter o diretor estático durante o movimento do fluido. No tensor de estresse, há termos que acoplam o movimento de matéria ao movimento do diretor. Dessa forma, o movimento de matéria pode fazer o diretor do cristal líquido rotacionar.

A constante responsável pelo acoplamento do movimento de translação e de rotação é chamada de segunda constante de rotação  $\gamma_2$  e é dada pela relação

$$\gamma_2 = \alpha_6 - \alpha_5. \quad (1.40)$$

O contrário também pode ocorrer, isto é, a reorientação do diretor pode causar escoamento denominado *backflow*. A última constante de rotação está relacionada ao movimento de rotação do diretor, independente de sua velocidade ou do gradiente dela. Ela recebe o nome de primeira constante de rotação  $\gamma_1$  e é dada pela expressão

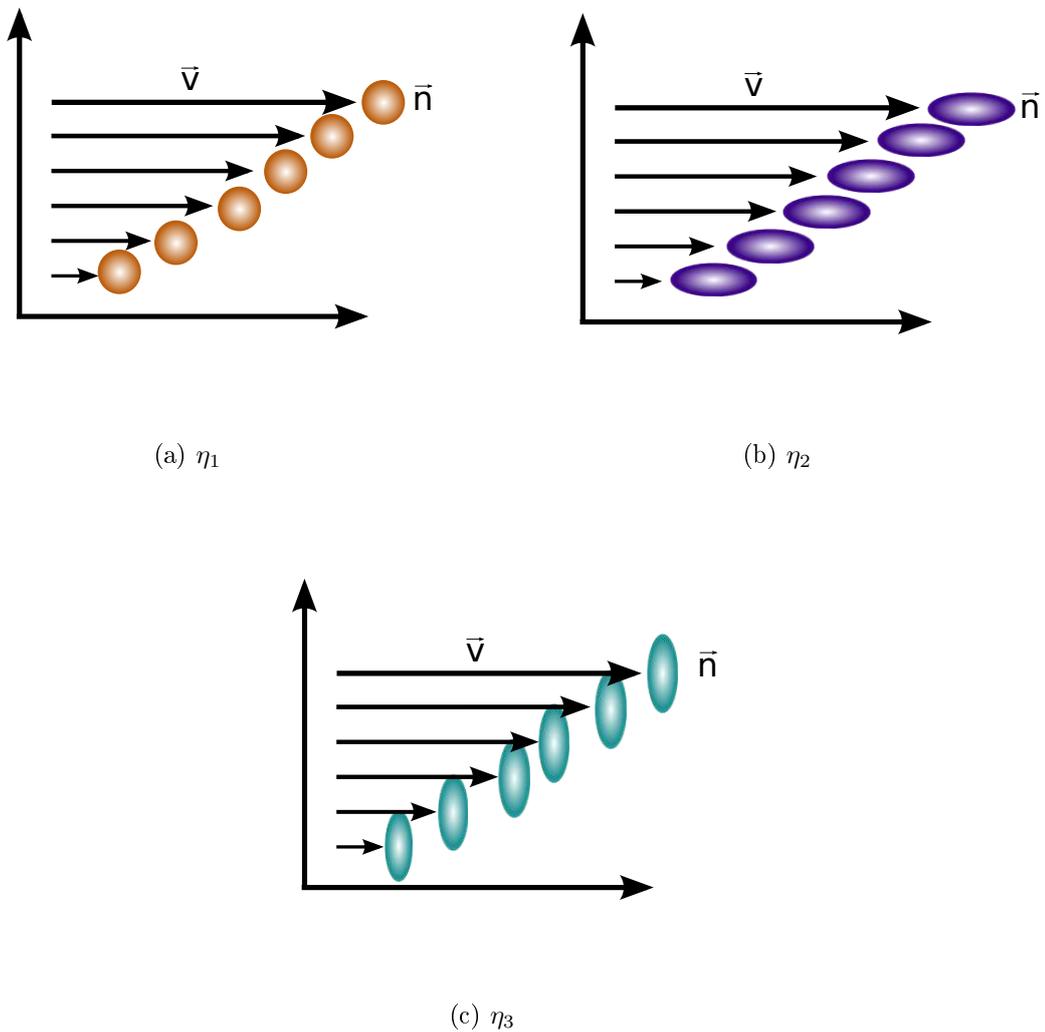


Figura 1.10: Geometrias utilizadas por Miesovicz.

$$\gamma_1 = \alpha_3 - \alpha_2. \quad (1.41)$$

Ela é extremamente importante no processo de relaxamento do diretor. Na ausência de movimentos de matéria ou quando eles podem ser desprezados, essa constante regula a dinâmica de relaxamento. Mais especificamente, os tempos característicos de relaxamento são proporcionais a ela ( $\tau \propto \gamma_1$ ).

# Capítulo 2

## Transições de Fréedericksz

Na ausência de fatores externos, a orientação de um cristal líquido confinado é determinado pelo ancoramento. Um fator externo, como um campo elétrico aplicado, pode reorientar o cristal líquido dependendo de sua intensidade. Esse fenômeno recebe o nome de transição de Fréedericksz [2].

Podemos dividir o problema das transições de Fréedericksz em dois tipos: estática e dinâmica. Em problemas estáticos, o objetivo é encontrar a configuração de equilíbrio do sistema, ignorando estados intermediários, enquanto que, em problemas dinâmicos, a finalidade é encontrar a configuração do diretor como uma sucessão de estados.

Há diversas geometrias possíveis para o estudo das transições de Fréedericksz. Para a realização deste trabalho, utilizaremos uma geometria chamada de alinhamento vertical, que será descrita abaixo <sup>1</sup>.

### 2.1 Estática

#### 2.1.1 Ancoramento forte

Para o estudo de um líquido confinado a uma temperatura constante, geralmente consideramos três densidades de energia: a elástica, relacionada com as deformações do diretor; a de ancoramento, relacionando a interação do diretor com as paredes do substrato confinador; e a dielétrica (e/ou diamagnética), relacionando a interação do cristal líquido com o campo externo. A energia total do sistema é obtida integrando as densidades de energia em todo o volume. Realizando essa operação, obtemos

$$E_{total} = \int (f_{frank} + f_e) dV + \int f_s dA, \quad (2.1)$$

sendo  $f_s$  a energia de superfície,  $f_{frank}$  a energia livre de Frank (equação (1.2)) e  $f_e$  a densidade de energia elétrica.

Para realizar o estudo das transições, consideramos dois planos infinitos e paralelos separados por uma distância  $d$  e totalmente preenchidos por um cristal líquido nemático, conhecida como geometria de *slab*. Embora essa situação não exista na realidade, é comum, em uma célula de cristal líquido, que a espessura de separação seja muito menor que as demais dimensões do substrato. Nessa situação, a geometria de *slab* é uma ótima aproximação para o problema real.

---

<sup>1</sup>O leitor interessado pode encontrar o estudo das transições para outras geometrias nas referências [2, 7].

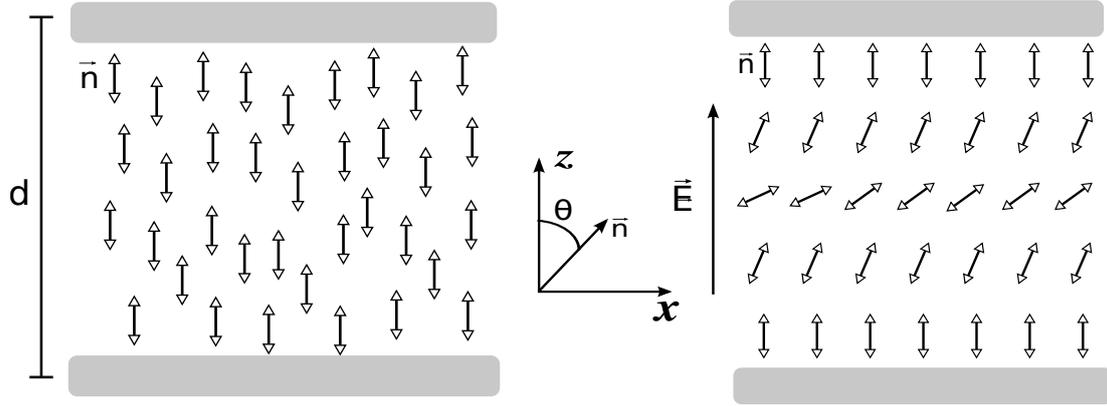


Figura 2.1: Representação esquemática da geometria estudada.

A origem do sistema de coordenadas é colocada sobre o plano inferior. Chamamos de  $z$  o eixo perpendicular aos substratos e  $\theta$  o ângulo formado entre este e o diretor do cristal líquido. Consideramos que o ancoramento é do tipo forte com orientação homeotrópica nas duas superfícies, também que um campo elétrico é aplicado paralelamente ao eixo  $z$  em toda a célula e, por fim, que o cristal líquido possui anisotropia dielétrica negativa ( $\Delta\epsilon < 0$ ). O esquema pode ser visualizado na figura 2.1.

Devido à simetria do problema, não há deformações do tipo *twist*. Dessa forma, o vetor diretor  $\vec{n}$  pode ser representado somente pelo ângulo  $\theta$ , podendo ser escrito na forma

$$\vec{n} = (\sin\theta, 0, \cos\theta). \quad (2.2)$$

Também pela simetria, podemos observar que o diretor apresenta variações somente ao longo da direção  $z$ , ou seja,  $\theta = \theta(z)$ . Assim, é possível tratar o sistema pela densidade de energia superficial, substituindo as integrais tridimensionais em  $dv$  por integrais unidimensionais em  $dz$ .

Como o ancoramento é do tipo forte, o diretor está sempre orientado na direção do eixo fácil nas superfícies. Assim são removidas as integrais de superfície e fixada a orientação nas paredes. Aplicando essas substituições, temos que

$$E_{total} = \int_0^d f_{frank}(\theta(z), \theta'(z)) + f_e(\theta(z)) dz, \quad \text{com } \theta(0) = 0 \quad \text{e} \quad \theta(d) = 0. \quad (2.3)$$

Efetuada as operações diferenciais para expressar a densidade de energia em termos de  $\theta$ , obtemos

$$\begin{aligned} \nabla \times \vec{n} &= \cos\theta \theta' \hat{y} \\ \nabla \cdot \vec{n} &= -\sin\theta \theta' \hat{z}, \end{aligned}$$

e, portanto,

$$\begin{aligned} \vec{n} \cdot \nabla \times \vec{n} &= 0 \\ (\nabla \cdot \vec{n})^2 &= \sin^2\theta \theta'^2 \\ |\vec{n} \times \nabla \times \vec{n}|^2 &= \cos^2\theta \theta'^2. \end{aligned} \quad (2.4)$$

Substituindo (2.4) em (1.2), podemos escrever a energia livre de Frank como:

$$f_{frank} = \frac{1}{2}(K_{11} \text{sen}^2\theta + K_{33} \text{cos}^2\theta)\theta'^2. \quad (2.5)$$

Para levar em consideração a energia elétrica do sistema, é necessário conhecermos a forma como o campo elétrico é aplicado. Durante o processo de orientação do diretor, há uma variação no campo elétrico no interior da célula devido à polarização e à reorientação do meio. Se a célula for mantida a um potencial constante, é necessário que um gerador de voltagem realize trabalho no sistema durante o processo.

Com o intuito de contornar essas dificuldades, consideramos o caso em que as deformações no diretor são bem pequenas. Nesse regime, o campo elétrico ao longo da célula é aproximadamente constante e a energia elétrica do sistema pode ser aproximada pela equação (1.8) [2]. Para obter a representação angular da densidade de energia dielétrica, substituímos a equação (2.2) na equação (1.8) e encontramos

$$f_e = -\frac{1}{2}\epsilon_0\Delta\epsilon E^2 \text{cos}^2\theta. \quad (2.6)$$

Substituindo os resultados das equações (2.5) e (2.6) em (2.3), obtemos

$$E = \int_0^d \left[ \frac{1}{2}(K_{11} \text{sen}^2\theta + K_{33} \text{cos}^2\theta)\theta'^2 - \frac{1}{2}\epsilon_0\Delta\epsilon E^2 \text{cos}^2\theta \right] dz. \quad (2.7)$$

A configuração do diretor é determinada minimizando o funcional acima. Isso pode ser feito encontrando uma solução para a equação de Euler-Lagrange:

$$\frac{\delta f}{\delta\theta} = \frac{\partial f}{\partial\theta} - \frac{\partial}{\partial z} \frac{\partial f}{\partial\theta'} = 0, \quad (2.8)$$

em que

$$f = \frac{1}{2}(K_{11} \text{sen}^2\theta + K_{33} \text{cos}^2\theta)\theta'^2 - \frac{1}{2}\epsilon_0\Delta\epsilon \text{cos}^2\theta. \quad (2.9)$$

Substituindo (2.9) em (2.8), a equação de Euler-Lagrange fica

$$-(K_{11} - K_{33}) \text{sen}\theta \text{cos}\theta \theta'^2 - (K_{11} \text{sen}^2\theta + K_{33} \text{cos}^2\theta)\theta'' + \epsilon_0\Delta\epsilon E^2 \text{cos}\theta \text{sen}\theta = 0. \quad (2.10)$$

A equação (2.10) é uma equação diferencial não linear, cuja solução analítica só foi encontrada para alguns casos específicos. Supomos que  $K_{11} = K_{33} = K$ , chamada de aproximação de constante elástica única, e que o campo elétrico seja pequeno, o que torna os valores de  $\theta$  próximos de 0. Isso nos permite desenvolver as funções trigonométricas da equação (2.10) em série de Taylor e considerar apenas os termos até a primeira ordem. A equação resultante terá a forma

$$-K\theta'' + \epsilon_0\Delta\epsilon E^2\theta = 0. \quad (2.11)$$

Como foi suposto que o cristal líquido utilizado é uniaxial negativo, isto é,  $\Delta\epsilon < 0$ , podemos substituir  $\Delta\epsilon = -|\Delta\epsilon|$ , obtendo então,

$$K\theta'' = -\epsilon_0|\Delta\epsilon|E^2\theta, \quad (2.12)$$

cuja solução geral é

$$\theta(z) = A \operatorname{sen} \left( \sqrt{\frac{\epsilon |\Delta\epsilon| E^2}{K}} z \right) + B \operatorname{cos} \left( \sqrt{\frac{\epsilon |\Delta\epsilon| E^2}{K}} z \right). \quad (2.13)$$

Substituindo a condição de contorno  $\theta(0) = 0$ , concluímos que  $B = 0$  e

$$\theta(z) = A \operatorname{sen} \left( \sqrt{\frac{\epsilon |\Delta\epsilon| E^2}{K}} z \right). \quad (2.14)$$

Substituindo a condição de contorno  $\theta(d) = 0$ , obtemos a relação:

$$\sqrt{\frac{\epsilon_0 \Delta\epsilon E^2}{K}} = m\pi \quad \text{com} \quad m = 1, 2, 3, 4\dots \quad (2.15)$$

Esse são os modos de distorção do diretor. Quando o valor de  $E$  é apenas grande o suficiente para perturbar o sistema, apenas o autovalor  $m = 1$  será ativado. Esse campo elétrico é chamado de campo crítico  $E_c$  e pode ser obtido da equação de autovalores, substituindo  $m = 1$  e  $E = E_c$ . Obtemos então,

$$E_c = \frac{\pi}{d} \sqrt{\frac{K}{\epsilon_0 |\Delta\epsilon|}}. \quad (2.16)$$

Da expressão (2.16), podemos tirar importantes conclusões. Podemos observar que, para a transição existir, é necessário que a constante de anisotropia elétrica seja negativa (lembrando que  $\Delta\epsilon = -|\Delta\epsilon|$ ). Isso ocorre porque, nesse caso, o diretor minimiza a energia elétrica ficando ortogonal ao campo elétrico, orientação contrária à imposta pelo ancoramento. Caso a constante fosse positiva, a orientação paralela minimizaria a densidade de energia, favorecendo a orientação imposta pelo ancoramento.

Além do sinal da constante dielétrica, também é preciso que o campo elétrico possua intensidade superior a  $E_c$  para que a transição ocorra. Isso acontece porque há duas densidades de energia envolvidas, a elétrica e a elástica, as quais são minimizadas por orientações opostas. Para a transição ocorrer, é necessário que a redução da energia elétrica compense o ganho de energia elástica do sistema, isso ocorre quando o campo elétrico atinge o valor  $E_c$ .

É importante notar que, na equação (2.16), o campo crítico é inversamente proporcional à espessura da célula. Isso ocorre porque, quanto menor a sua espessura, maior a densidade de energia elástica no volume [2]. A voltagem crítica do sistema é obtida multiplicando a equação(2.16) por  $d$ :

$$V_c = \pi \sqrt{\frac{K}{\epsilon_0 |\Delta\epsilon|}}, \quad (2.17)$$

que é independente da espessura da célula.

## 2.1.2 Ancoramento fraco

Para o estudo das transições de Fréederickzs sob o regime de ancoramento fraco, consideramos uma célula com as mesmas características que a utilizada na seção anterior. Podemos observar novamente que as variações no diretor podem ocorrer somente ao longo do eixo  $z$  e que deformações do tipo *twist* não serão possíveis. Devido ao ancoramento da célula ser do tipo fraco, não podemos mais supor que o diretor é fixo nas extremidades.

Portanto, a energia total apresentará termos de superfície. Dessa forma, a energia total será dada por

$$E_{total} = \int_0^d (f_{frank}(\theta(z), \theta'(z)) + f_e(\theta(z))) dz + f_s(\theta(z)|_{z=0}) + f_s(\theta(z)|_{z=d}) dz, \quad (2.18)$$

em que  $f_s$  são as densidades de energia superficial. Para a energia superficial, utilizamos o modelo de Rapini-Papoular, expresso na equação (1.3). Como não há deformações do tipo *twist*, a energia de ancoramento azimutal não precisa ser determinada.

Novamente, admitimos que o ângulo eixo fácil é ortogonal à parede, matematicamente expresso pela relação  $\theta_s = 0$ . Admitimos também, que a energia de ancoramento polar possui o mesmo valor nas duas superfícies.

Aplicando as novas condições em conjunto com a energia livre de Frank, obtemos

$$E = \int_0^d \left[ \frac{1}{2} (K_{11} \sin^2 \theta + K_{33} \cos^2 \theta) \theta' - \frac{1}{2} \epsilon_0 \Delta \epsilon E^2 \cos^2 \theta \right] dz + \frac{1}{2} W \sin^2 \theta|_{z=0} + \frac{1}{2} W \sin^2 \theta|_{z=d}. \quad (2.19)$$

Esse funcional também é minimizado pela equação de Euler-Lagrange

$$\begin{aligned} \frac{\partial f}{\partial \theta} - \frac{\partial}{\partial z} \frac{\partial f}{\partial \theta'} &= \\ &= -(K_{11} - K_{33}) \sin \theta \cos \theta \theta'^2 - (K_{11} \sin^2 \theta + K_{33} \cos^2 \theta) \theta'' + \epsilon_0 \Delta \epsilon E^2 \cos \theta \sin \theta = 0, \end{aligned} \quad (2.20)$$

mas com as condições de contorno

$$\left( -\frac{\partial f}{\partial \theta'} + \frac{\partial f_s}{\partial \theta} \right) \Big|_{z=0} = -(K_{11} \sin^2 \theta + K_{33} \cos^2 \theta) \theta' + (W \sin \theta \cos \theta)|_{z=0} = 0 \quad (2.21a)$$

$$\left( \frac{\partial f}{\partial \theta'} + \frac{\partial f_s}{\partial \theta} \right) \Big|_{z=d} = (K_{11} \sin^2 \theta + K_{33} \cos^2 \theta) \theta' + (W \sin \theta \cos \theta)|_{z=d} = 0. \quad (2.21b)$$

Novamente, o nosso objeto de estudo é somente o comportamento do campo crítico. Para tanto, utilizamos a aproximação de constante elástica única  $K_{11} = K_{33} = K$  e supomos que o valor do campo elétrico seja apenas um pouco acima do necessário para que a transição ocorra. Dessa forma, temos também, que  $\cos \theta \approx 1$  e  $\sin \theta \approx \theta$ .

Por último, supomos que  $\Delta \epsilon$  é uma quantidade negativa, que será substituída pela quantidade  $\Delta \epsilon = -|\Delta \epsilon|$ , em que  $|\Delta \epsilon|$  tem valor positivo por definição. Realizadas as substituições, a equação geral do problema pode ser escrita como

$$-K \theta'' - \epsilon_0 |\Delta \epsilon| E^2 \theta = 0, \quad (2.22)$$

e as condições de contorno como

$$-K \theta'|_{z=0} + W \theta|_{z=0} = 0 \quad (2.23a)$$

$$K \theta'|_{z=d} + W \theta|_{z=d} = 0. \quad (2.23b)$$

Definindo  $\xi = \sqrt{\frac{K}{\epsilon_0 |\Delta\epsilon| E^2}}$ , podemos reescrever a equação (2.22) na forma

$$\theta'' = -\frac{\theta}{\xi^2}, \quad (2.24)$$

cuja solução geral é:

$$\theta = A \cos\left(\frac{z}{\xi} + \psi\right). \quad (2.25)$$

Observamos que, novamente, a função deve ser simétrica em relação ao centro da célula, o que é matematicamente expresso por  $\theta'\left(\frac{d}{2}\right) = 0$ . Aplicando essa condição, obtemos

$$\theta(z) = A \cos\left(\frac{z - d/2}{\xi}\right). \quad (2.26)$$

Definindo  $L = K/W$  e aplicando as condições de contorno, concluímos que

$$\frac{\text{sen}\left(\frac{d}{2\xi}\right)}{\xi} = \frac{\cos\left(\frac{d}{2\xi}\right)}{L}. \quad (2.27)$$

Verificamos que tanto a condição de contorno (2.23a) quanto a (2.23b) levam à mesma equação.

Como  $A \cos[d/(2\xi)]$  é o ângulo em qualquer uma das superfícies, se o campo aplicado for ligeiramente superior ao campo crítico, teremos  $\frac{d}{2\xi} \approx \frac{\pi}{2}$ . Isso permite aproximar  $\cos\frac{d}{2\xi} = \frac{\pi}{2} - \frac{d}{2\xi}$  e  $\text{sen}\left(\frac{d}{2\xi}\right) \approx 1$ . Substituindo essas expressões e reorganizando os termos, temos que:

$$\frac{1}{\xi} = \frac{\pi}{d + 2L}. \quad (2.28)$$

E, portanto,

$$E_c = \frac{\pi}{d + 2L} \sqrt{\frac{K}{\epsilon_0 |\Delta\epsilon|}}. \quad (2.29)$$

Quando  $W \rightarrow \infty$ , temos que  $L \rightarrow 0$  e, então, recuperamos o campo crítico para o caso de ancoramento forte. Para o caso de ancoramento fraco, o sistema se comporta como se estivesse sob ancoramento forte, mas possuísse o comprimento  $d + 2L$ , como ilustra a figura 2.2. Por essa razão, a grandeza  $L$  recebe o nome de comprimento de extrapolação e a grandeza  $d + 2L$  é denominada espessura efetiva.

### 2.1.3 Ancoramento forte com *pretilt*

Como último caso estático, estudaremos o campo elétrico crítico para induzir a transição em uma célula com *pretilt*  $\theta_s$  pequeno e igual nos dois substratos. A geometria é a mesma utilizada na seção anterior e o ancoramento é do tipo forte. Nesse caso, a energia do sistema é novamente:

$$E_{total} = \int_0^d \left[ \frac{1}{2} (K_{11} \text{sen}^2\theta + K_{33} \text{cos}^2\theta) \theta' - \frac{1}{2} \epsilon_0 \Delta\epsilon E^2 \text{cos}^2\theta \right] dz. \quad (2.30)$$

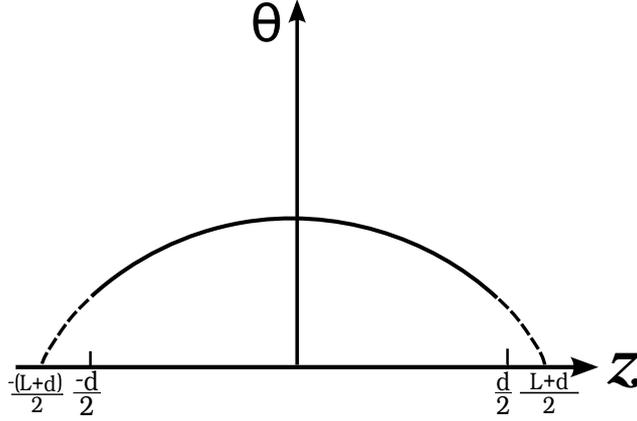


Figura 2.2: Representação esquemática da célula e do comprimento de extrapolação.

Minimizando esse funcional, obtemos novamente a equação (2.10), mas com condições de contorno ligeiramente diferentes. Como o ancoramento é do tipo forte, os ângulos são fixos na borda, porém, na presença de *pretilt*, temos  $\theta(d) = \theta(0) = \theta_s$ .

Definindo  $\beta = \theta - \theta_s$  e  $\beta'' = \theta''$  para campos elétricos ligeiramente maiores que o campo crítico, temos, dessa forma  $\beta$  muito pequeno. Isso permite aproximar  $\cos(\beta + \theta_s) = \cos(\theta_s) - \beta \sin(\theta_s)$  e  $\sin(\beta + \theta_s) = \beta \cos \theta_s + \sin \theta_s$ . Admitimos, de novo, que a constante de anisotropia dielétrica é negativa e a substituímos por  $-|\Delta\epsilon|$ . Usando esses valores na equação geral, obtemos

$$-\epsilon_0|\Delta\epsilon|E^2 \left[ \frac{\sin(2\theta_s)}{2} + \beta \cos(2\theta_s) \right] - [K_{11} \sin^2\theta_s + K_{33} \cos^2(\theta_s)]\beta'' = 0, \quad (2.31)$$

cujas condições de contorno são  $\beta(d) = \beta(0) = 0$ . A solução geral da equação (2.31) é:

$$\beta = B \cos \left[ \sqrt{\frac{\epsilon_0|\Delta\epsilon|E^2 \cos(2\theta_s)}{(K_{11} \sin^2\theta_s + K_{33} \cos^2\theta_s)^2}} \left( z - \frac{d}{2} \right) \right] - \frac{1}{2} \tan(2\theta_s). \quad (2.32)$$

Aplicando as condições de contorno, encontramos que

$$\beta = \frac{1}{2} \tan(2\theta_s) \left\{ \frac{\cos \left[ \sqrt{\frac{\epsilon_0|\Delta\epsilon|E^2 \cos(2\theta_s)}{(K_{11} \sin^2\theta_s + K_{33} \cos^2\theta_s)^2}} \left( z - \frac{d}{2} \right) \right]}{\cos \left[ \sqrt{\frac{\epsilon_0|\Delta\epsilon|E^2 \cos(2\theta_s)}{(K_{11} \sin^2\theta_s + K_{33} \cos^2\theta_s)^2}} \left( \frac{d}{2} \right) \right]} - 1 \right\}. \quad (2.33)$$

Como podemos observar,  $\beta$  é diferente de 0 para qualquer valor não nulo de campo elétrico. Diferente dos casos anteriores, esse sistema não apresenta campo crítico, todos os valores de campo elétrico produzem deformações no diretor.

A eliminação do comportamento crítico ocorre devido à quebra de simetria de reflexão causada pela inserção do *pretilt* [2].

## 2.2 Dinâmica

### 2.2.1 Ancoramento forte

A dinâmica de orientação de um cristal líquido é um fenômeno complexo. Isso se deve ao acoplamento entre os movimentos de rotação e de translação do material. O processo de rotação do diretor pode gerar movimento de matéria denominado *backflow*. Esse caso mais geral está fora do escopo deste trabalho e não será abordado.

Novamente, selecionamos a geometria da figura 2.1 para o estudo do problema. Assim como nas seções anteriores, a simetria do problema não permite deformações do tipo *twist* e as deformações no diretor possuem dependência espacial somente na variável  $z$ .

A rotação do diretor é governada pela dinâmica de superamortecimento, em que o torque elástico e elétrico são equilibrados pelo torque viscoso do material e o termo de inércia pode ser desprezado [2]. O torque viscoso é proporcional à velocidade de rotação e à viscosidade rotacional. Os torques elétricos e elásticos podem ser obtidos pela variação da energia do sistema. Matematicamente, isso pode ser expresso como:

$$\gamma_1 \frac{\partial \theta}{\partial t} = - \frac{\delta f}{\delta \theta}, \quad (2.34)$$

sendo  $\gamma_1$  a viscosidade de rotação e  $f$  a densidade de energia do sistema expressa pela equação (2.9). Admitindo que o campo elétrico é muito pequeno, de forma que as funções trigonométricas possam ser aproximadas para pequenos ângulos, e realizando a aproximação de constante elástica única, obtemos

$$\gamma_1 \frac{\partial \theta}{\partial t} = K \frac{\partial^2 \theta}{\partial z^2} - \epsilon_0 \Delta \epsilon E^2 \theta. \quad (2.35)$$

A especificação completa do problema exige mais algumas equações complementares, no caso, as condições de contorno e a condição inicial. As condições de contorno são implementadas de forma usual, nesse caso, temos  $\theta(0) = \theta(d) = 0$ ; já a condição inicial determina a configuração inicial do diretor.

Analisando a equação (2.35), podemos concluir que, para valores muito altos de  $t$ , a solução da equação apresenta variações muito pequenas em relação ao tempo. Essa situação é chamada de estado estacionário.

Removido o campo elétrico, o sistema relaxa até obter uma nova configuração de equilíbrio em um novo estado estacionário. O tempo característico para esse processo de relaxamento, que será o objeto de análise desta seção, é uma grandeza pela qual podemos avaliar a velocidade em que ocorre o processo.

A equação geral que descreve o relaxamento do sistema pode ser obtida removendo o torque elétrico da equação (2.35):

$$\gamma_1 \frac{\partial \theta}{\partial t} = K \frac{\partial^2 \theta}{\partial z^2}, \quad (2.36)$$

que é essencialmente uma equação do tipo difusão, cuja solução geral pode ser obtida por separação de variáveis. Portanto, escrevendo  $\theta(z, t) = \Theta(z)\Omega(t)$ , obtemos

$$\Theta''(z) = -C^2 \Theta(z) \quad (2.37a)$$

$$\Omega'(t) = -\frac{K}{\gamma_1} C^2 \Omega(t), \quad (2.37b)$$

sendo  $C$  uma constante. A equação (2.37a) tem por solução

$$\Theta(z) = \sum_{m=1}^{\infty} A_m \operatorname{sen} \left( \frac{m\pi z}{d} \right), \quad (2.38)$$

em que  $A_m$  são constantes determinadas pelas condições iniciais.

Utilizando esse resultado para resolver a parte temporal, temos que

$$\Theta(z) = \sum_{m=1}^{\infty} A_m \operatorname{sen} \left( \frac{m\pi z}{d} \right) e^{(-\frac{t}{\tau_m})}, \quad (2.39)$$

sendo  $\tau_m = \frac{d^2 \gamma_1}{(\pi m)^2 K}$ .

A constante  $\tau_m$  é chamada de constante de relaxação. Podemos notar que a deformação inicial é decomposta em um grupo de autofunções que relaxam com tempos diferentes, determinados pela constante  $\tau_m$ .

Como cada autofunção relaxa com um tempo característico independente das demais, o tempo de relaxamento do diretor  $\tau_0$  é dado pelo menor tempo de relaxação. Este caso é obtido quando  $m = 1$  e tem o valor

$$\tau_0 = \frac{\gamma_1}{K \pi^2} d^2. \quad (2.40)$$

É importante observar que o tempo de relaxamento é independente da forma da deformação inicial, necessitando apenas que as deformações sejam pequenas o suficiente para que a aproximação de pequenos ângulos continue sendo válida.

## 2.2.2 Ancoramento fraco com *pretilt*

O estudo da dinâmica da transição de Fréederickzs para o caso de ancoramento fraco gera dificuldades adicionais que precisam ser observadas com cuidado.

Quando a transição ocorre em uma célula de cristal líquido fortemente ancorada, há um processo de reorientação do diretor no volume, mas, na superfície o diretor permanece estático. Já quando o ancoramento é do tipo fraco, o argumento anterior não pode ser utilizado. O diretor também se distorce na superfície e, quando removido o campo elétrico, relaxa até a condição de equilíbrio.

As dificuldades surgem em determinar qual o regime dinâmico do processo de relaxamento na superfície.

### Formulação do problema

No caso estático, a quebra de simetria introduzida pela superfície pode ser tratada pela adição de um torque produzido pelo ancoramento. No dinâmico, além da presença do desse torque, também temos que considerar a presença de um torque viscoso provocado pelo movimento relativo do material em relação à superfície.

As constantes de viscosidade são determinadas pelas interações moleculares do sistema. Em uma região relativamente pequena próxima à superfície, as interações do líquido com o substrato podem alterar o valor dessas constantes. O valor da viscosidade na superfície e como ela varia nessa região têm sido objeto de discussões [3–6].

Dentre os modelos disponíveis, utilizamos o modelo de Derzhanski e Petrov [23]. Nele, é proposta a introdução de parâmetros fenomenológicos que são efetivos somente na superfície do substrato, em uma região de espessura muito pequena comparada com as demais dimensões da célula.

Nos casos aqui escolhidos para análise, os únicos movimentos relevantes são as rotações realizadas pelo diretor. Assim, introduzimos apenas um parâmetro de viscosidade de rotação pura na superfície (análogo a  $\gamma_1$ ), que chamaremos de  $\gamma_s$ .

Nesse modelo, consideramos também, que, na superfície o relaxamento também é do tipo superamortecido, de modo que os torques elásticos e de ancoramento são equilibrados pelo torque viscoso.

Consideramos novamente uma célula com espessura  $d$ , mas, desta vez com a origem do referencial posicionado no centro da célula, de forma que o substrato inferior fique localizado em  $-\frac{d}{2}$  e o substrato superior em  $\frac{d}{2}$ .

Devido à espessura da camada de cristal líquido influenciada pela superfície ser muito pequena, podemos incorporar a dinâmica dessa região através de condições de contorno na forma

$$\gamma_s \frac{\partial \theta(z, t)}{\partial t} \Big|_{z=-\frac{d}{2}} = - \left( -\frac{\partial f}{\partial \theta'} + \frac{\partial f_s}{\partial \theta} \right) \Big|_{z=-\frac{d}{2}} \quad (2.41a)$$

$$\gamma_s \frac{\partial \theta(z, t)}{\partial t} \Big|_{z=\frac{d}{2}} = - \left( \frac{\partial f}{\partial \theta'} + \frac{\partial f_s}{\partial \theta} \right) \Big|_{z=\frac{d}{2}}. \quad (2.41b)$$

No volume, o regime de relaxamento é governado pela teoria usual de Ericksen-Leslie. A forma da equação geral irá variar conforme os agentes externos envolvidos. Na ausência deles, ela terá a forma da equação (2.10).

Determinados os parâmetros utilizados e o regime de relaxamento na superfície, podemos formular matematicamente o problema. O relaxamento será estudado novamente na geometria de *slab*. Examinaremos o caso mais geral, em que o *pretilt* e os ancoramentos podem ser diferentes nas duas paredes. Assim, definiremos  $\theta_{s+}(t)$  e  $W_+$  como *pretilt* e ancoramento na superfície superior, e  $\theta_{s-}(t)$  e  $W_-$  como *pretilt* e ancoramento na superfície inferior.

A dependência em  $t$  no ângulo de *pretilt* foi introduzida para permitir que a solução encontrada também englobasse situações em que o ângulo do eixo fácil variasse com o tempo, como, por exemplo, quando o ancoramento é dado por polímeros foto-sensíveis. Contudo, admitimos que a dependência temporal possui a forma  $\theta_{s\pm}(t) = \theta_{i\pm} + (\theta_{f\pm} - \theta_{i\pm})e^{-t/\tau_{s\pm}}$ , sendo  $\tau_{s\pm}$  um tempo característico de cada superfície.

Por fim, consideramos que o campo elétrico é aplicado perpendicularmente ao substrato e que o cristal líquido apresenta anisotropia dielétrica negativa. Devido às simetrias, o sistema não apresenta deformações do tipo *twist* e o diretor só apresenta variações ao longo do eixo  $z$ .

Assim como anteriormente, dividimos o problema em duas partes. Na primeira, o campo elétrico é ligado e, além do torque elástico, há também um torque elétrico para equilibrar-se com o viscoso. Ao remover o campo, o processo de relaxamento se inicia, dessa vez, sem a presença do torque elétrico. Em geral, o primeiro processo possui equações mais complicadas que o segundo.

Primeiramente, consideramos o caso em que o campo elétrico é ligado. Se ele é apenas forte o suficiente para retirar o sistema do equilíbrio, podemos utilizar novamente a aproximação de pequenos ângulos para as funções trigonométricas e a aproximação de campo

elétrico constante para a energia dielétrica. Aproximando também  $K_{11} = K_{33}$ , obtemos a equação geral

$$\gamma_1 \frac{\partial \theta}{\partial t} = K \frac{\partial^2 \theta}{\partial z^2} - \epsilon_0 \Delta \epsilon E^2 \theta, \quad (2.42)$$

com as condições de contorno

$$\gamma_s \frac{\partial \theta(z, t)}{\partial t} \Big|_{z=-\frac{d}{2}} - K \frac{\partial \theta(z, t)}{\partial z} \Big|_{z=-\frac{d}{2}} + W_- [\theta(z, t) - \theta_{s-}(t)] \Big|_{z=-\frac{d}{2}} = 0 \quad (2.43a)$$

$$\gamma_s \frac{\partial \theta(z, t)}{\partial t} \Big|_{z=\frac{d}{2}} + K \frac{\partial \theta(z, t)}{\partial z} \Big|_{z=\frac{d}{2}} + W_+ [\theta(z, t) - \theta_{s+}(t)] \Big|_{z=d} = 0. \quad (2.43b)$$

A condição inicial é determinada pela orientação do diretor antes do campo elétrico ser ativado e varia de situação para situação. Assim como no caso de ancoramento forte, a solução para esse conjunto de equações apresenta maiores variações nos instantes iniciais e, depois, permanece quase constante para tempos relativamente grandes. Chamaremos essas soluções quase constantes de estados estacionários.

Removido o campo elétrico, inicia-se o segundo processo de dinâmica, no qual o diretor relaxa até uma nova configuração de equilíbrio. Esse processo é descrito pela equação geral

$$\gamma_1 \frac{\partial \theta}{\partial t} = K \frac{\partial^2 \theta}{\partial z^2}, \quad (2.44)$$

com as condições de contorno determinadas pelas equações (2.43a) e (2.43b).

Matematicamente, as condições iniciais dessa equação são dadas pela configuração do diretor no instante em que o campo elétrico é removido. Consideramos que  $t = 0$  no início do processo de relaxamento, logo, essa condição inicial é referida por  $\theta(z, 0)$ .

### 2.2.3 Solução das equações

Primeiramente, serão feitas algumas substituições de variáveis para reescrever as equações na forma adimensional. Definindo  $z_r = z/d$ ,  $u_{\pm} = \frac{W_{\pm} d}{K}$ ,  $\tau_D = \gamma_1 \frac{d^2}{K}$ ,  $t_r = t/\tau_d$ ,  $v = \frac{\gamma_s}{\gamma_1 d}$  e  $\tau_{sr\pm} = \frac{\tau_{s\pm}}{\tau_D}$  e substituindo essas definições em (2.43a), (2.43b) e (2.44), podemos escrever

$$\frac{\partial \theta(z_r, t_r)}{\partial t_r} = \frac{\partial^2 \theta(z_r, t_r)}{\partial z_r^2}, \quad (2.45)$$

com as condições de contorno

$$\frac{\partial \theta(z_r, t_r)}{\partial z_r} \Big|_{z=-\frac{1}{2}} + u_+ [\theta(z_r, t_r) - \theta_{s+}(t_r)] \Big|_{z=-\frac{1}{2}} + v \frac{\partial \theta(z_r, t_r)}{\partial t_r} \Big|_{z=-\frac{1}{2}} = 0 \quad (2.46a)$$

$$-\frac{\partial \theta(z_r, t_r)}{\partial z_r} \Big|_{z=\frac{1}{2}} + u_- [\theta(z_r, t_r) - \theta_{s-}(t_r)] \Big|_{z=\frac{1}{2}} + v \frac{\partial \theta(z_r, t_r)}{\partial t_r} \Big|_{z=\frac{1}{2}} = 0. \quad (2.46b)$$

Aplicando a transformada de Laplace<sup>2</sup> na coordenada temporal das equações (2.46) e (2.45), obtemos

<sup>2</sup>Definida por  $\mathcal{L}[F(t)] = \int_0^{\infty} F(t) e^{-st} dt$ .

$$\frac{\partial^2 \theta}{\partial z_r^2} - s\theta(z_r, s) = -\theta(z_r, 0), \quad (2.47)$$

e as condições de contorno

$$\pm \frac{\partial \theta(z_r, s)}{\partial z_r} \Big|_{z=\pm \frac{1}{2}} + (u_{\pm} + vs)\theta(z_r, s) \Big|_{z=\pm \frac{1}{2}} = v\theta(z_r, 0) \Big|_{z_r=\pm \frac{1}{2}} + u\theta_{s\pm}(s), \quad (2.48)$$

em que  $s$  é a variável do espaço de Laplace. Podemos observar que, quando realizada na variável temporal, a transformada de Laplace possui a característica de incorporar as condições iniciais nas demais equações do problema. Nesse caso, isso ocorre pelo termo  $\theta(z_r, 0)$ .

A equação resultante só possui derivadas espaciais e pode ser resolvida com o auxílio das funções de Green. Como o operador em conjunto com as condições de contorno formam um operador autoadjunto, podemos utilizar uma função de Green para remover os termos independentes de  $\theta(z_r, s)$ .

Para isso, postulamos uma função  $G(z_r, z'_r, s)$  que satisfaz a equação geral

$$\frac{\partial^2 G(z_r, z'_r, s)}{\partial z_r^2} - sG(z_r, z'_r, s) = \delta(z_r - z'_r) \quad (2.49)$$

e as condições de contorno

$$\pm \frac{\partial G(z_r, z'_r, s)}{\partial z} \Big|_{z=\pm \frac{1}{2}} + (u_{\pm} + vs)G(z_r, z'_r, s) \Big|_{z=\pm \frac{1}{2}} = 0. \quad (2.50)$$

Por meio dessas equações, podemos determinar a função de Green do sistema. De posse dela, a função  $\theta(z_r, s)$  pode ser recuperada utilizando a relação

$$\begin{aligned} \theta(z'_r, s) = & - \int_{-1/2}^{1/2} \theta(z_r, 0)G(z_r, z'_r, s) dz_r - [v\theta(z_r, 0) + u_+\theta(s)]G(z_r, z'_r, s) \Big|_{z=\frac{1}{2}} \\ & - [v\theta(z_r, 0) + u_-\theta(s)]G(z_r, z'_r, s) \Big|_{z=-\frac{1}{2}}. \end{aligned} \quad (2.51)$$

Como as variáveis  $z_r$  e  $z'_r$  representam distâncias em relação à origem do sistema de coordenadas, após a realização da integral, a variável  $z'_r$  pode ser substituída por  $z_r$  novamente.

Resolvendo a equação (2.49) e aplicando as condições (2.50), obtemos

$$\begin{aligned} G(z_r, z'_r, s) = & - \frac{1}{\sqrt{s}\mathcal{F}(s)} \left\{ \sqrt{s} \cosh \left[ \sqrt{s} \left( \frac{1}{2} + z_r \right) \right] + (u_- + vs) \sinh \left[ \sqrt{s} \left( \frac{1}{2} + z_r \right) \right] \right\} \\ & \times \left\{ \sqrt{s} \cosh \left[ \sqrt{s} \left( \frac{1}{2} - z'_r \right) \right] + (u_+ + vs) \sinh \left[ \sqrt{s} \left( \frac{1}{2} - z'_r \right) \right] \right\}, \end{aligned} \quad (2.52)$$

para  $-\frac{1}{2} < z_r < z'_r$ , e

$$G(z_r, z'_r, s) = -\frac{1}{\sqrt{s}\mathcal{F}(s)} \left\{ \sqrt{s} \cosh \left[ \sqrt{s} \left( \frac{1}{2} + z'_r \right) \right] + (u_- + vs) \sinh \left[ \sqrt{s} \left( \frac{1}{2} + z'_r \right) \right] \right\} \\ \times \left\{ \sqrt{s} \cosh \left[ \sqrt{s} \left( \frac{1}{2} - z_r \right) \right] + (u_+ + vs) \sinh \left[ \sqrt{s} \left( \frac{1}{2} - z_r \right) \right] \right\}, \quad (2.53)$$

para  $z'_r < z_r < 1/2$ , em que

$$\mathcal{F}(s) = [s + (u_+ + vs)(u_- + vs)] \sinh(\sqrt{s}) + \sqrt{s}(u_+ + u_- + 2vs) \cosh(\sqrt{s}). \quad (2.54)$$

Observamos porém, que, pela relação (2.51), encontramos a solução  $\theta(z_r, s)$  definida no espaço de Laplace quando queremos  $\theta(z_r, t)$ . Para recuperar a solução temporal, é preciso inverter a transformada de Laplace.

Para inverter a função  $G(z_r, z'_r, s)$ , precisamos fechar um contorno no plano complexo que englobe todos os autovalores dessa função. Substituindo  $s = -k_n^2$ , os autovalores são dados por

$$[-k_n^2 + (u_+ - vk_n^2)(u_- - vk_n^2)] \text{sen}(k_n) + k_n(u_+ + u_- - 2vk_n^2) \text{cos}(k_n) = 0. \quad (2.55)$$

De posse dos autovalores, a função inversa é dada pela expressão

$$G(z_r, z'_r; t) = -\sum_{k_n=1}^{\infty} \frac{e^{-k_n^2 t_r}}{\tilde{\mathcal{F}}(k_n)} \left\{ k_n \cos \left[ k_n \left( \frac{1}{2} + z_r \right) \right] + (u_- - vk_n^2) \text{sen} \left[ k_n \left( \frac{1}{2} + z_r \right) \right] \right\} \\ \times \left\{ k_n \cosh \left[ k_n \left( \frac{1}{2} - z'_r \right) \right] + (u_+ - vk_n^2) \text{sen} \left[ k_n \left( \frac{1}{2} - z'_r \right) \right] \right\},$$

para  $-\frac{1}{2} < z_r < z'_r$ , e

$$G(z_r, z'_r; t) = -\sum_{k_n=1}^{\infty} \frac{e^{-k_n^2 t_r}}{\tilde{\mathcal{F}}(k_n)} \left\{ k_n \cos \left[ k_n \left( \frac{1}{2} + z'_r \right) \right] + (u_- - vk_n^2) \text{sen} \left[ k_n \left( \frac{1}{2} + z'_r \right) \right] \right\} \\ \times \left\{ k_n \cosh \left[ k_n \left( \frac{1}{2} - z_r \right) \right] + (u_+ - vk_n^2) \text{sen} \left[ k_n \left( \frac{1}{2} - z_r \right) \right] \right\}, \quad (2.56)$$

para  $z'_r < z_r < 1/2$ , em que

$$\tilde{\mathcal{F}}(k_n) = \left. \frac{\partial \mathcal{F}}{\partial s} \right|_{s=-k_n^2}.$$

Com a equação (2.51) e a função de Green, temos todo o aparato teórico para analisar o comportamento do diretor durante o processo de relaxação. Nesse processo, o diretor pode apresentar distorções complexas, mas elas podem ser expressas como superposição de um novo conjunto de autofunções.

Na solução encontrada, temos um número infinito de autofunções disponíveis. Cada uma delas é composta de um produto de duas funções: uma com dependência temporal e

outra com dependência espacial, ambas contendo o autovalor  $k_n$ . Embora a parte espacial seja complicada de analisar, a temporal é relativamente simples.

Em todas as autofunções, a parte temporal tem a forma  $e^{-k_n^2 t_r}$ . Quanto maior o valor de  $k_n$ , mais rapidamente a autofunção se aproxima de zero. Podemos observar que esse resultado independe da parte espacial. Dessa forma, podemos concluir que a função que mais demora para relaxar é a governada pelo menor autovalor, geralmente o primeiro.

Substituindo a variável  $t_r$  de volta para as variáveis usuais, podemos escrever a parte exponencial das autofunções na forma  $e^{-\frac{t}{\tau_n}}$ , em que  $\tau_n = \frac{\gamma_1 d^2}{K k_n^2}$ . O maior tempo é chamado de tempo de relaxamento do diretor  $\tau_0$  e pode ser obtido substituindo o menor dos  $k_n$  na equação acima. Essa expressão, que está sendo proposta neste trabalho, é a mais completa da literatura e será analisada mais profundamente no capítulo 4.

## 2.3 Tempos característicos de relaxamento

Na seção anterior, estudamos o processo de dinâmica de relaxação do diretor e observamos que ele possui um tempo característico  $\tau_0$ .

Experimentalmente, não temos acesso direto à orientação do diretor em uma amostra de cristal líquido. Em geral, é medida a diferença de fase ou a transmitância ótica do sistema.

A diferença de fase pode ser calculada pela expressão (1.31) e, se as variações no diretor forem pequenas, é possível aproximar o transiente de fase por [24]

$$\delta(t) = \delta_0 e^{-\frac{2t}{\tau_0}}, \quad (2.57)$$

sendo  $\delta_0$  a diferença de fase no início do processo e  $\tau_0$  é o tempo de relaxamento do diretor.

Podemos definir um tempo de relaxamento de fase ( $t_p$ ) como o tempo necessário para a diferença de fase inicial atingir um valor pré-estabelecido, nesse caso, o tempo para ele relaxar até  $\delta_0/e^2$ .

Podemos utilizar o mesmo princípio e definir um tempo característico para a variação de transmitância ótica. Chamaremos de tempo de relaxamento ótico  $T_{otc}$  o tempo para a transmitância ótica atingir 10% do valor inicial.

Para pequenos ângulos, podemos utilizar a equação (2.57) para obter uma expressão analítica para o tempo de decaimento ótico.

Substituindo a equação (2.57) na equação (1.34), obtemos

$$I(t) = \text{sen}^2 \left( \frac{\delta_0 e^{-\frac{2t}{\tau_0}}}{2} \right). \quad (2.58)$$

O tempo de decaimento ótico  $T_{otc}$  vai ser atingido quando

$$0.1I_0 = 0.1 \text{sen}^2 \left( \frac{\delta_0}{2} \right) = \text{sen}^2 \left( \frac{\delta_0 e^{-2T_{otc}/\tau_0}}{2} \right), \quad (2.59)$$

sendo  $I_0$  a transmitância ótica inicial. Após alguns cálculos algébricos, obtemos

$$T_{otico} = \frac{\tau_0}{2} \ln \left( \frac{\delta_0/2}{\text{sen}^{-1}(\sqrt{0.1} \text{sen}(\frac{\delta_0}{2}))} \right). \quad (2.60)$$

Para pequenos ângulos, o tempo de decaimento ótico possui uma dependência aproximadamente linear com a constante de relaxamento.

## 2.4 *Displays*

Os rápidos tempos de resposta e a forte sensibilidade a campos eletromagnéticos fazem dos cristais líquidos excelentes materiais para aplicações eletro-ópticas. Dentre elas, podemos citar os *steering lasers*, *tunable-focus-lens* e *displays*. Como os conceitos estudados no presente trabalho possuem relação direta com a tecnologia de *displays*, faremos uma rápida abordagem do tema.

Há três tipos de *display* de cristal líquido: transmissivos, reflectivos e transflectivos. Em todos os modelos, o cristal líquido executa a função de válvula de luz. Dessa forma, será descrito em mais detalhes apenas o funcionamento de um *display* transmissivo. O leitor interessado pode achar mais informações sobre os outros tipos *displays* nas referências [1, 25].

Um *display* de cristal líquido (LCD) é basicamente uma tela de tamanho macroscópico dividida em pequenas regiões microscópicas independentes denominadas *pixels* (do inglês *picture element*). Cada *pixel* é responsável por gerar um ponto luminoso que, por sua vez, é combinado com os demais para formar a imagem que observamos.

Em um LCD transmissivo, a luz é produzida no próprio *display*. Uma lâmpada é posicionada atrás de uma célula composta de dois polarizadores e uma camada de cristal líquido depositada entre eles. O esquema pode ser observado na figura 2.3.

O feixe de luz produzido pela lâmpada incide sobre o primeiro polarizador, para então, atravessar a camada de cristal líquido. Nesse processo, o feixe adquire um estado de polarização bem definido no primeiro polarizador e, em seguida, tem esse estado alterado pelo cristal líquido. Ao atravessar o segundo polarizador, parte da luz será absorvida

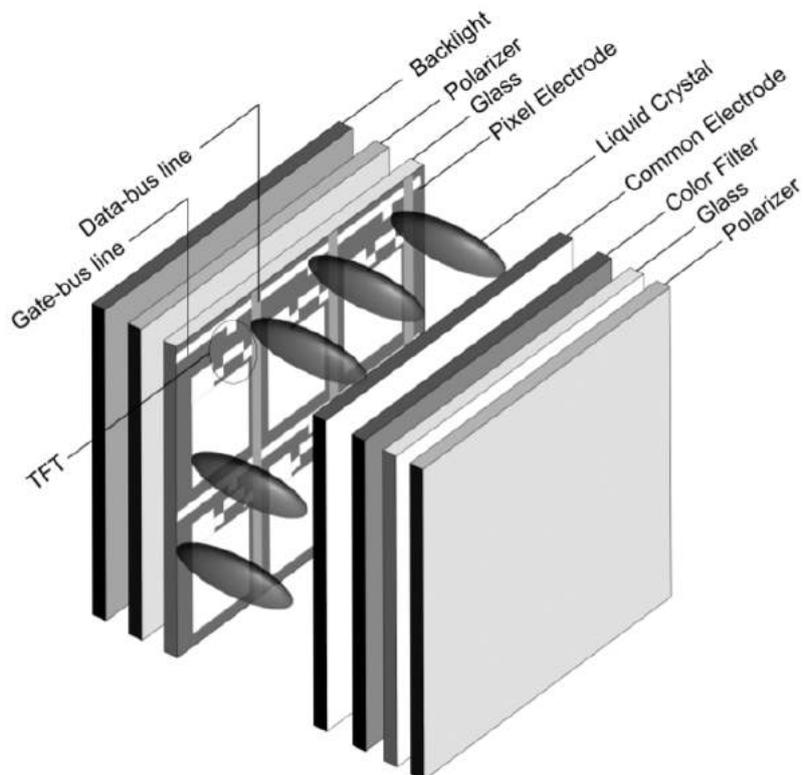


Figura 2.3: Esquema de um *pixel* de um *display* transmissivo. Figura retirada da referência [26], página 125.

dependendo de sua polarização.

Utilizando um campo elétrico para orientar o cristal líquido, é possível alterar o caminho ótico da luz. Dessa forma, regula-se a intensidade da luz transmitida pelo *pixel*.

Dentre os *displays* disponíveis, esse é o que apresenta melhor qualidade de imagem em ambientes com luz controlada. Seu principal defeito, não obstante, é apresentar perda de qualidade quando a luz ambiente é muito intensa.

Um caso clássico ocorre quando o LCD é utilizado em ambientes com iluminação solar. Como a intensidade da luz produzida pelo *display* é menos intensa que a da luz solar, é comum que o brilho da tela seja ofuscado pela luz refletida do sol. Por essas características, esse tipo de *display* é geralmente utilizado em computadores e televisores domésticos.

Para situações em que há forte iluminação, foi desenvolvido um modelo de *display* que utiliza a luz ambiente para funcionar (denominado reflectivo). Para isso, no local da lâmpada fluorescente, é colocado um espelho de alumínio para refletir a luz que advém de uma fonte externa. Devido a esse mecanismo, esse *display* não sofre de ofuscamento luminoso e é mais eficiente no gasto de energia, já que não a consome para gerar luz. Sua principal desvantagem é apresentar imagens pouco nítidas quando a iluminação ambiente é fraca; em geral, *displays* reflectivos produzem imagens menos nítidas que transmissivos.

Os LCDs transflectivos são uma combinação dos dois modelos anteriores: utilizam tanto uma fonte de luz interna quanto a luz ambiente. Em ambientes fortemente iluminados, eles operam basicamente como um *display* reflectivo com um pequeno auxílio de uma fonte de luz interna para aumentar a nitidez da imagem. Em ambientes mais escuros, eles podem aumentar a iluminação interna e operar predominantemente como um *display* transmissivo.

# Capítulo 3

## Formulação Numérica

No capítulo anterior, abordamos as transições de Fréederickzs analiticamente. Para o caso estático, encontramos o campo elétrico crítico que induz a transição e, para o caso dinâmico, encontramos a variação do diretor em função do tempo e os tempos característicos do sistema. Entretanto, esses resultados são válidos apenas para o regime de pequenos ângulos do diretor.

Com o objetivo analisar situações onde as deformações do diretor atingem ângulos maiores, é necessário minimizar o funcional de energia sem linearizar as funções trigonométricas ou utilizar aproximações de constantes elásticas.

Neste capítulo, iremos resolver a equação de Frank completa através de uma técnica numérica, a fim de obter os tempos característicos do sistema em casos mais gerais. Para tanto, utilizaremos o método de diferenças finitas.

### 3.1 Diferenças finitas

Para formular um problema em termos de equações diferenciais, além das equações, também é preciso especificar o domínio de definição das funções envolvidas, que pode ser finito ou infinito, mas em geral, contínuo. Por continuidade, entendemos que, entre dois pontos quaisquer, sempre haverá uma quantidade infinita de pontos intermediários.

Podemos redefinir este domínio para que entre dois pontos quaisquer sempre haja um número finito (ou nulo) de pontos. As funções e as derivadas envolvidas são definidas nesse conjunto de pontos, que chamamos de malha (do inglês *mesh*).

Para utilizar a técnica de diferenças finitas, é conveniente que todos os pontos da malha possuam a mesma distância entre si. Se  $x_{inicial}$  e  $x_{final}$  forem o início e o fim da região, podemos dividir essa região em  $N + 1$  pontos. Cada ponto terá distância  $\Delta x$  definida por

$$\Delta x = \frac{x_{final} - x_{inicial}}{N}. \quad (3.1)$$

Como a quantidade de pontos que compõem a malha é finita, podemos numerá-los. Se o primeiro começar em 0, então, o último ponto receberá o número  $N$ . Para nos referir ao valor de uma função  $f$  no ponto  $i$  da malha, utilizamos a notação  $f_i$ , comum em diferenças finitas.

A notação  $f(x)$  pode ser recuperada encontrando-se à posição  $x$  do ponto  $i$  avaliado. Como as distâncias entre os pontos são mantidas fixas, o valor de  $x$  pode ser encontrado pela relação

$$x_i = x_0 + i\Delta x, \quad (3.2)$$

e, também,

$$x_{i+1} = x_i + \Delta x. \quad (3.3)$$

Essas relações são importantes para a transformação de uma equação diferencial em diferenças finitas. Matematicamente, as condições iniciais são geralmente expressas em termos da posição  $x$ . Com as relações acima, podemos expressar as condições iniciais em termos da posição da malha  $i$ .

A discretização da dependência temporal necessita de um pouco mais de atenção. Como o domínio temporal é geralmente infinito, não podemos dividi-lo em um número finito de pontos. Para discretizar o fluxo do tempo, assumimos apenas que o tempo flua em intervalos de tempo discretos  $\Delta t$ .

Para indicar o instante do tempo a que estamos nos referindo, utilizamos o super-índice  $t$ . Assim, o valor da função  $f$  no ponto  $i$  da malha e no instante de tempo  $t$  será referido por  $f_i^t$ . O esquema geométrico da malha pode ser visualizado na figura 3.1.

Por fim, precisamos definir derivadas de funções nesse espaço discreto. A forma mais adequada faz uso das séries de Taylor.

Desenvolvendo a função  $f(x_i + \Delta x)$  centrada em  $x_i$  e truncando-a até o termo de primeira ordem, obtemos

$$f(x_i + \Delta x) = f(x_i) + f'(x) \Big|_{x=x_i} \Delta x + O(\Delta x^2), \quad (3.4)$$

em que  $O(\Delta x^2)$  representa a ordem do erro de truncamento. Esse termo significa que, se reduzirmos o valor de  $\Delta x$ , o erro obtido pelo truncamento da série se reduz quadraticamente.

Utilizando as relações (3.3) e (3.2), podemos rescrever a equação (3.4) como

$$f'_i = \frac{f_{i+1} - f_i}{\Delta x} + O(\Delta x). \quad (3.5)$$

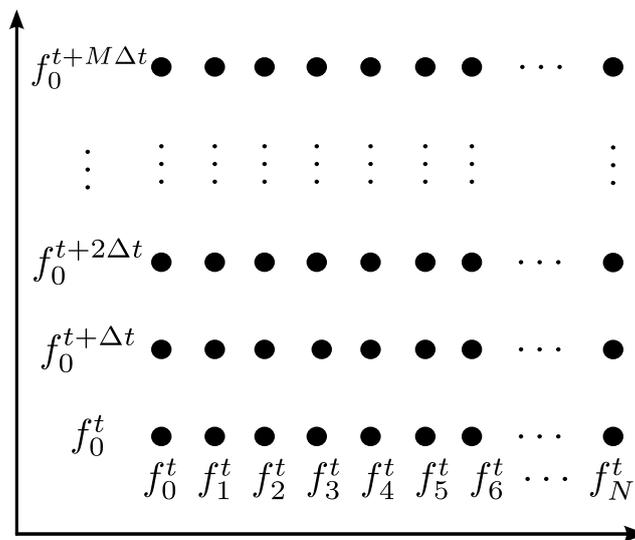


Figura 3.1: Representação esquemática de uma malha com discretização da coordenada espacial  $x$  e temporal  $t$ .

Essa primeira aproximação de derivada é chamada de derivada progressiva. Podemos notar que o erro dela é de primeira ordem em  $\Delta x$ .

Repetindo o processo para a  $f(x_i - \Delta x)$ , temos que

$$f'_i = \frac{f_i - f_{i-1}}{\Delta x} + O(\Delta x). \quad (3.6)$$

Essa nova aproximação de derivada faz uso do ponto local e do anterior da malha, e recebe o nome de derivada regressiva. O erro dela também é de primeira ordem em  $\Delta x$ .

Se truncarmos as séries de  $f(x_i - \Delta x)$  e de  $f(x_i + \Delta x)$  nos termos de segunda ordem e subtrairmos a primeira série da segunda, cancelamos o termo de segunda ordem. Dessa forma, obtemos

$$f'_i = \frac{f_{i+1} - f_{i-1}}{2\Delta x} + O(\Delta x^2). \quad (3.7)$$

Essa derivada, chamada de centrada, é uma ordem mais precisa que as derivadas progressivas e regressivas.

Para obter a derivada segunda, truncamos as séries de Taylor de  $f(x_{i+1} + \Delta x)$  e  $f(x_i - \Delta x)$  até a terceira ordem e, depois, somamos as duas séries. Após realizar alguns cálculos algébricos, é possível escrever a derivada segunda como [27]

$$f''(x_i) = \frac{x_{i+1} + x_{i-1} - 2x_i}{\Delta x^2} + O(\Delta x^2), \quad (3.8)$$

chamada de derivada simétrica.

Além dessas expressões, é possível obter outras formas de derivadas utilizando mais pontos da malha. Entretanto, elas podem requerer um número muito grande de operações matemáticas, que são difíceis de serem implementadas em um algoritmo. Por essa razão, utilizamos apenas as aproximações que foram definidas acima<sup>1</sup>.

## 3.2 Encontrando a distribuição do diretor numericamente

Utilizando agora os conceitos abordados na seção anterior, podemos resolver as equações dinâmicas do diretor sem as aproximações de constante única ou de pequenos ângulos.

Assim como no capítulo 2, estudamos aqui o sistema na geometria de *slab*, na qual o campo elétrico é aplicado perpendicularmente ao *slab*. Utilizamos o ancoramento homeotrópico com *pretilts* iguais nas duas superfícies.

Novamente, pela simetria do problema, o diretor fica contido no plano  $x - z$ , apresentando variações somente no ângulo  $\theta$  e ao longo de  $z$ . A energia livre de Frank terá a forma

$$f_{frank} = \frac{1}{2}(K_{11} \text{sen}^2\theta + K_{33} \text{cos}^2\theta)\theta'^2. \quad (3.9)$$

Estudamos aqui o caso em que o processo de reorientação ocorre à diferença de potencial constante  $V$ . Portanto, a densidade de energia dielétrica é dada pela expressão (1.27),

---

<sup>1</sup>O leitor interessado pode encontrar informações sobre outras aproximações na referência [27].

$$f_e = \frac{\sigma^2}{\epsilon_0(\epsilon_{\perp} + \Delta\epsilon \cos^2 \theta)}, \quad (3.10)$$

em que  $\sigma$  é dado por

$$\sigma = \frac{1}{\int_0^d \frac{dz}{\epsilon_0(\epsilon_{\perp} + \Delta\epsilon \cos^2 \theta)}}. \quad (3.11)$$

A densidade de energia total é dada pela soma das energias dielétrica e elástica. Minimizando esse funcional, obtemos

$$\begin{aligned} \gamma_1 \frac{\partial \theta}{\partial t} &= (K_{11} \sin^2 \theta + K_{33} \cos^2 \theta) \frac{\partial^2 \theta}{\partial z^2} + \\ &(K_{11} - K_{33}) \sin \theta \cos \theta \left( \frac{\partial \theta}{\partial z} \right)^2 - \frac{\sigma^2 \Delta\epsilon \sin \theta \cos \theta}{\epsilon_0(\epsilon_{\perp} + \Delta\epsilon \cos^2 \theta)^2}, \end{aligned} \quad (3.12)$$

com as condições de contorno

$$\gamma_s \frac{\partial \theta}{\partial t} \Big|_{z=d} = \frac{W \sin[2(\theta_s - \theta(z, t))]}{2} \Big|_{z=d} - \frac{\partial \theta}{\partial z} (K_{11} \sin^2 \theta + K_{33} \cos^2 \theta)^2 \Big|_{z=d} \quad (3.13)$$

$$\gamma_s \frac{\partial \theta}{\partial t} \Big|_{z=0} = \frac{W \sin[2(\theta_s - \theta(z, t))]}{2} \Big|_{z=0} + \frac{\partial \theta}{\partial z} (K_{11} \sin^2 \theta + K_{33} \cos^2 \theta)^2 \Big|_{z=0}. \quad (3.14)$$

Para utilizar a técnica de diferenças finitas, dividimos o *slab* em  $N$  pedaços de tamanhos iguais, cujo comprimento é dado pela equação (3.1). Representamos a dependência espacial de  $\theta$  pelo subíndice  $i$  e a dependência temporal pelo superíndice  $t$ . Assim, o valor de  $\theta$  no ponto de número  $i$  e tempo  $t$  será representado por  $\theta_i^t$ . Dessa forma, podemos substituir nas equações 3.12 e (3.13),  $\theta(x, t)$  por  $\theta_i^t$ .

Substituindo, também, as derivadas espaciais de primeira ordem por diferenças finitas centradas, as derivadas temporais por diferenças finitas progressivas e as derivadas espaciais de segunda ordem por diferenças simétricas, encontramos após alguns cálculos algébricos, que

$$\begin{aligned} \theta_i^{t+\Delta t} &= \theta_i^t + \frac{\Delta t}{\gamma_1} \left[ (K_{11} \sin^2 \theta_i^t + K_{33} \cos^2 \theta_i^t) \left( \frac{\theta_{i+1}^t + \theta_{i-1}^t - 2\theta_i^t}{\Delta z^2} \right) + \right. \\ &+ (K_{11} - K_{33}) \sin \theta_i^t \cos \theta_i^t \left( \frac{\theta_{i+1}^t - \theta_{i-1}^t}{2\Delta z} \right)^2 - \left. \frac{\sigma^2 \Delta\epsilon \sin \theta_i^t \cos \theta_i^t}{\epsilon_0(\epsilon_{\perp} + \Delta\epsilon \cos^2 \theta_i^t)^2} \right] \\ &= \theta_i^t + \delta \theta_i. \end{aligned} \quad (3.15)$$

Para as condições de contorno, podemos utilizar as derivadas progressivas no tempo, mas não as derivadas centrais no espaço. Como os extremos não possuem os dois vizinhos definidos, temos que utilizar a derivada que necessita apenas do vizinho disponível.

Assim, para o contorno superior, utilizamos derivadas regressivas para obter

$$\begin{aligned}
\theta_N^{t+\Delta t} &= \theta_N^t + \frac{\Delta t}{\gamma_s} \left[ \frac{W \sin[2(\theta_s - \theta_N^t)]}{2} - \left( \frac{\theta_N^t - \theta_{N-1}^t}{\Delta z} \right) (K_{33} \cos^2 \theta_N^t + K_{11} \sin^2 \theta_N^t)^2 \right] \\
&= \theta_N^t + \delta\theta_N.
\end{aligned} \tag{3.16}$$

Para o contorno inferior, utilizamos as derivadas progressivas no espaço e as progressivas no tempo, o que nos conduz à equação

$$\begin{aligned}
\theta_0^{t+\Delta t} &= \theta_0^t + \frac{\Delta t}{\gamma_s} \left[ \frac{W \sin[2(\theta_s - \theta_0^t)]}{2} + \left( \frac{\theta_1^t - \theta_0^t}{\Delta z} \right) (K_{33} \cos^2 \theta_0^t + K_{11} \sin^2 \theta_0^t)^2 \right] \\
&= \theta_0^t + \delta\theta_0.
\end{aligned} \tag{3.17}$$

Podemos observar que, se conhecermos os valores de  $\theta_i^t$ ,  $\theta_{i+1}^t$  e  $\theta_{i-1}^t$ , podemos calcular o ângulo no instante seguinte  $\theta_i^{t+\Delta t}$ . Para os contornos, com o valor no ponto  $i$  e um dos vizinhos, já é possível calcular o valor de  $\theta$  no instante seguinte. Lembrando que, a cada passo temporal o diretor irá possuir uma nova orientação, assim, é necessário um novo cálculo da densidade de carga  $\sigma$  para cada passo. Esse processo pode ser repetido indefinidamente até o tempo desejado. Um esquema do processo de passo temporal pode ser visto na figura 3.2.

Para iniciar o processo, precisamos definir os valores de  $\theta$  no instante inicial. Isso é determinado pela condição inicial do problema, variando de situação para situação. Nesse caso, utilizamos como condição inicial o estado de equilíbrio na ausência de campo elétrico, dado por  $\theta_i^0 = \theta_s$ .

Como o domínio da função é infinito no tempo, temos que elaborar um critério para encerrar essa etapa do programa. No caso estudado, estamos procurando um estado estacionário do diretor, pois nele, o diretor não apresenta mais variações no tempo. Numericamente, é impossível obter esse estado, uma vez que sempre haverá pequenas variações independente do número de passos que forem utilizados.

Para contornar esse problema, definimos que a função se encontra no estado estacionário quando sua variação em um intervalo de tempo é menor que um valor estabelecido.

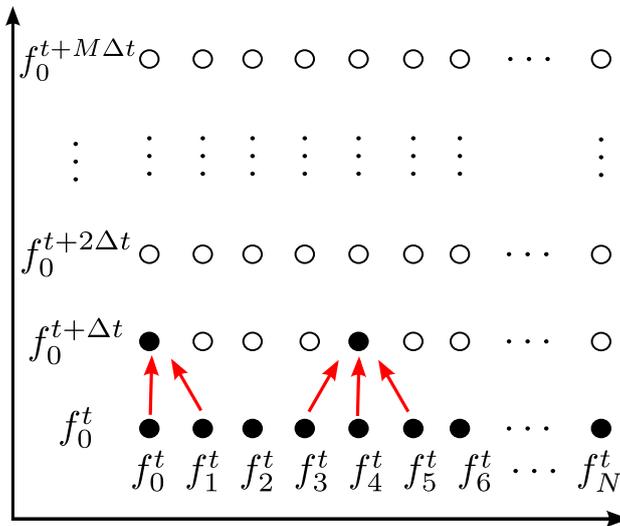


Figura 3.2: Representação dos pontos da malha envolvidos em um passo temporal.

Mais precisamente, paramos o programa quando a maior variação entre todos os  $\delta\theta_i$  for menor que um valor pré-estabelecido  $\epsilon$ , assim, quando

$$\max(\delta\theta_i) < \epsilon, \quad (3.18)$$

encerramos essa etapa do programa.

Com os valores de  $\theta_i$  no estado estacionário, podemos estudar o relaxamento do diretor, o qual compartilha das mesmas condições de contorno que o processo de levantamento, e sua equação geral difere apenas pela ausência do termo de energia dielétrica.

Removendo o termo de energia dielétrica da equação (3.12) e repetindo o processo aproximativo para diferenças finitas, obtemos

$$\begin{aligned} \theta_i^{t+\Delta t} &= \theta_i^t + \frac{\Delta t}{\gamma_1} \left[ (K_{33} \cos^2 \theta_i^t + K_{11} \sin^2 \theta_i^t) \left( \frac{\theta_{i+1}^t + \theta_{i-1}^t - 2\theta_i^t}{\Delta z^2} \right) + \right. \\ &\quad \left. + (K_{11} - K_{33}) \sin \theta_i^t \cos \theta_i^t \left( \frac{\theta_{i+1}^t - \theta_{i-1}^t}{2\Delta z} \right)^2 \right] \\ &= \theta_i^t + \delta\theta_i. \end{aligned} \quad (3.19)$$

As equações de contorno serão dadas pelas equações (3.16) e (3.17).

Novamente, conhecidos os valores de  $\theta_i^t$ , podemos encontrar todos os valores de  $\theta_i^{t+\Delta t}$ . Esse processo é repetido até o sistema entrar em um novo estado estacionário, também definido pela condição (3.18).

O algoritmo que realiza essas operações foi escrito na linguagem de programação FORTRAN e está disponível no apêndice A.

### 3.2.1 Testando o algoritmo

Devido à complexidade das equações envolvidas, não há como demonstrar matematicamente que o processo iterativo acima converge para a solução correta. Para confirmar a convergência do algoritmo, ele será testado em situações cujo comportamento é conhecido. Se o algoritmo se comportar bem em um razoável intervalo dos parâmetros envolvidos, então, atestamos que o programa funciona bem.

Antes de iniciar os testes, é necessário observar que os resultados simulados não serão iguais aos teóricos. Para a formulação do algoritmo, não foi necessário nenhum tipo de limitação em relação aos ângulos do diretor ou em relação às constantes elásticas. Portanto, caso o algoritmo apresente bom funcionamento, os resultados dele estão mais próximos da realidade que os obtidos teoricamente.

Para a realização dos testes, utilizamos os parâmetros do cristal líquido MLC-6608 (Merck), que podem ser encontrados na tabela 3.1 [28].

Para os intervalos de tempo, usamos  $\Delta t = 0.005 \mu m$ . Os valores utilizados de  $\Delta x$  variam de espessura para espessura. Para pequenas, é necessário utilizar menores valores de  $\Delta x$  para obter bons resultados. A quantidade de pontos  $N$  utilizados por espessura pode ser encontrada na tabela 3.2.

Os testes serão iniciados pela análise da distribuição do diretor em uma célula de cristal líquido quando este está em equilíbrio com o campo elétrico. Para tanto, precisamos encontrar primeiro a voltagem crítica em que ocorre a transição de Fréedrickzs. Se utilizarmos  $\theta_s = 0$  e ancoramento forte, a voltagem crítica do sistema pode ser calculada pela

Parâmetro	Valor
$K_{11}$	16.7 pN
$K_{22}$	7 pN
$K_{33}$	18.1 pN
$\epsilon_{\perp}$	7.8
$\epsilon_{\parallel}$	3.6
$n_e$	1.558
$n_o$	1.475
$\gamma_1$	186 mPa

Tabela 3.1: Valores dos parâmetros utilizados para obter as soluções analíticas e numéricas.

$d(\mu m)$	2	3	4	5	6	7	8	9	10
$N$	41	41	51	51	61	71	81	91	101

Tabela 3.2: Número de pontos utilizados por espessura.

expressão 2.17. Utilizando os parâmetros do cristal líquido supracitados, encontramos  $V_{th} = 2.19V_{rms}$ .

Numericamente, é preciso deixar um pequeno valor de *pretilt* para que não ocorra formação de domínios. Para tanto, utilizamos no mínimo,  $\theta_s = 0.01^\circ$ .

A distribuição do diretor em uma célula pode ser visualizada na figura 3.3. Podemos observar que, para voltagem de  $V = 0.9V_{th}$ , os diretores ficam todos orientados verticalmente, o que indica que a transição não ocorreu ainda. Para a diferença de potencial  $V = 1.1V_{th}$ , as deformações já são visíveis e expressivas, e para voltagens superiores a  $1.1V_{th}$ , as deformações ficam ainda maiores.

Esses resultados estão em boa concordância com o esperado. Pouco abaixo da voltagem crítica, a transição não ocorre; para voltagens pouco acima, as deformações já são expressivas; e para valores maiores, as deformações são muito grandes. Podemos, ainda, observar que as deformações são maiores no centro da célula e quase inexistentes no substrato, isso porque o ancoramento é do tipo forte.

Para analisar o comportamento do sistema em um número maior de situações, é conveniente olharmos para o ângulo do diretor no centro da célula  $\theta_m$ , por ser o maior ângulo apresentado pelo sistema. Esses valores podem ser visualizados na figura 3.4.

Podemos observar que, para  $\theta_s = 0.01^\circ$ , o sistema apresenta comportamento crítico muito próximo da voltagem teórica, como já verificamos anteriormente. Para valores de diferença de potencial abaixo de  $V = 2.17V$ , o ângulo máximo permanece praticamente invariante. A partir de  $2.19V$ , o ângulo máximo dá um salto e começa a subir rapidamente. Mais ao final da curva, o comportamento é mais suave.

Lembrando que, neste caso, o ancoramento não é infinitamente forte e o ângulo de *pretilt* é diferente de 0, portanto, é esperado que o sistema não inicie o comportamento crítico exatamente em  $V = 2.19V_{rms}$ .

Para os demais ângulos de *pretilt*, conforme o seu valor aumenta, o sistema perde aos poucos o comportamento crítico. Embora haja variações antes de atingir a voltagem crítica, elas são razoavelmente pequenas, o que está de acordo com o esperado.

Para avaliar a evolução temporal do sistema, analisaremos a distribuição do diretor em função de  $z$  para diversos valores de  $t$ .

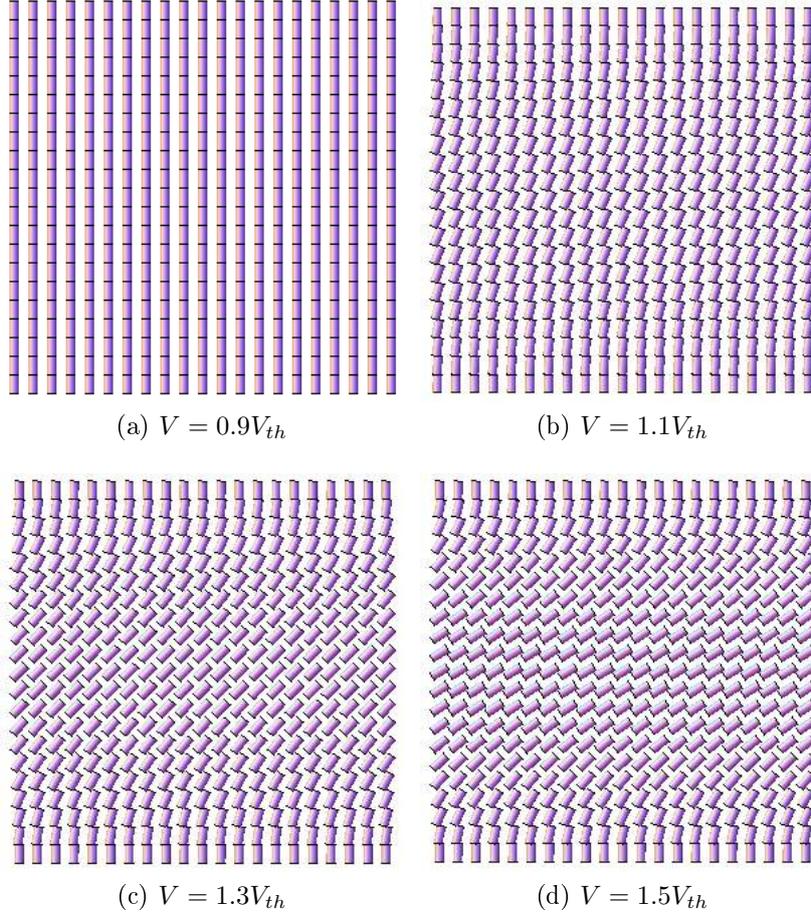


Figura 3.3: Representação da distribuição de diretores em uma célula de cristal líquido para os parâmetros  $W = 10^{-3} \text{ J/m}^2$ ,  $\theta_s = 0.01^\circ$  e  $d = 5 \mu\text{m}$ .

Para essas simulações, foram utilizados novamente os parâmetros do cristal líquido MLC-6608,  $\theta_s = 3^\circ$ ,  $W = 10^{-4} \text{ J/m}^2$ ,  $V = 1.4V_{th}$  e  $d = 4 \mu\text{m}$ . Os resultados podem ser visualizados nas figuras 3.5a e 3.5b.

Novamente, o sistema se comporta como esperado. Em ambos os processos, os ângulos variam suavemente ao longo de  $z$  e os tempos de subida e de relaxamento são aceitáveis para as variáveis escolhidas. Em ambos os casos, é possível observar que, para tempos altos, as variações no diretor são muito pequenas, indicando que o sistema está se aproximando do estado estacionário.

### 3.3 Calculando a transmitância ótica e a diferença de fase

Na seção anterior, descrevemos um método aproximado para encontrar os valores de  $\theta_i^t$ . Com esses valores, podemos visualizar a variação do diretor em função do tempo. Para encontrar os tempos característicos do sistema, é preciso conhecer a diferença de fase e a transmitância ótica.

Para tanto, foram incluídos no algoritmo numérico duas funções adicionais, uma para cálculo de diferença de fase e outra para cálculo de transmitância ótica. O cálculo da diferença de fase é realizado efetuando a integral da equação (1.32). No algoritmo A.1,

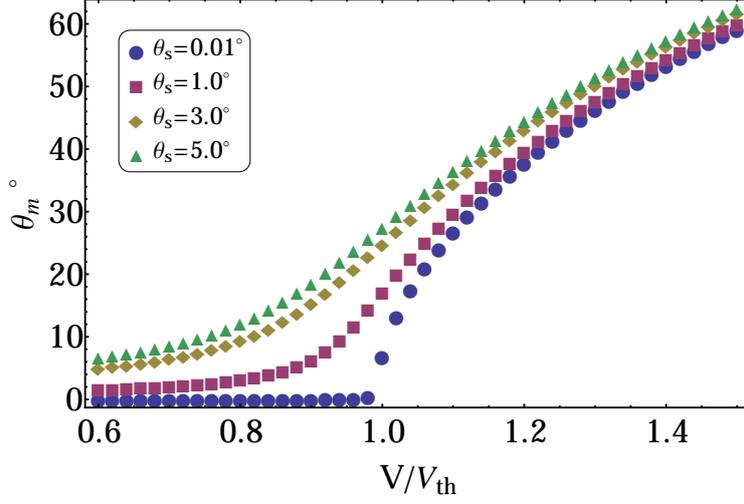


Figura 3.4: Valores de  $\theta_m$  vs  $V/V_{th}$  para  $W = 10^{-3} \text{J}/m^2$  e  $d = 5 \mu\text{m}$ .

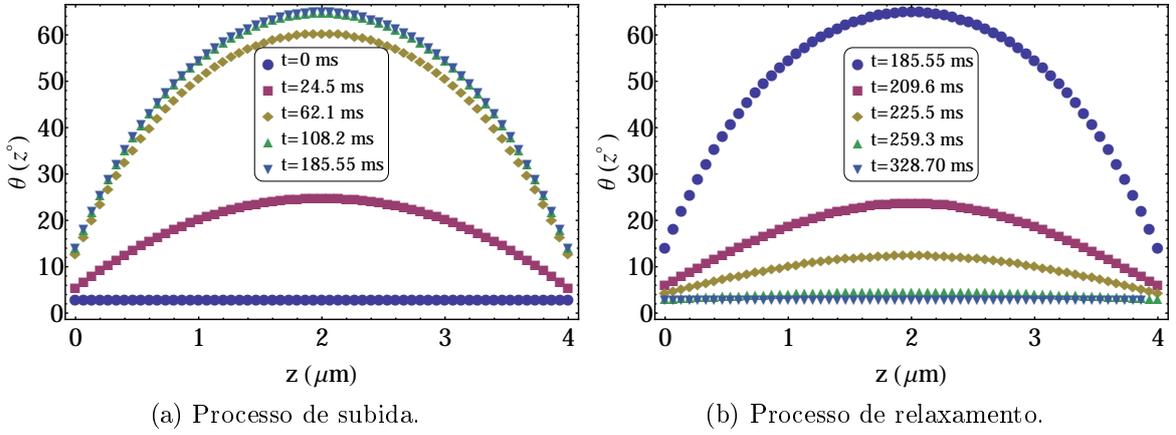


Figura 3.5: Ângulo  $\theta$  por  $z$  simulado com os parâmetros:  $\theta_s = 3^\circ$ ,  $W = 10^{-4} \text{J}/m^2$ ,  $V = 1.4V_{th}$  e  $d = 4 \mu\text{m}$ .

ela é feita na sub-rotina `calcpfase`, utilizando a regra 1/3 de Simpson.

De posse da diferença de fase, podemos calcular a transmitância ótica pela relação (1.34). Como não há movimento do diretor ao longo do plano  $x - y$ , a escolha do ângulo  $\beta$  é arbitrária, mas por conveniência, escolhemos  $\beta = 45^\circ$ .

Embora já encontramos uma maneira de calcular as duas grandezas necessárias, há situações em que a integral da equação (1.32) pode não convergir muito bem. Para evitar isso, também utilizamos um método mais geral que permite o cálculo da transmitância ótica para sistemas compostos de sucessões de elementos óticos, conhecido como método de Jones [2, 26].

Esse método pode ser aplicado a qualquer célula de cristal líquido uniaxial com acoplamento de diversos elementos óticos, como por exemplo, em polarizadores.

### 3.3.1 Método de Jones

O estudo do comportamento da luz em meios anisotrópicos apresenta elevada dificuldade devido às reflexões e difrações que ocorrem no interior do material. Quando a incidência da luz é normal, esses efeitos podem ser desprezados. Nessas situações, há

um método que permite calcular o efeito de um elemento ótico sobre o feixe luminoso, o método de Jones [2, 26].

Nele, o estado de polarização da luz é representado por meio de um vetor coluna, chamado vetor de Jones. O efeito dos elementos óticos é representado por matrizes que realizam operações sobre esses vetores, chamadas matrizes de Jones.

Quando um feixe se propaga em um meio uniaxial, apenas as componentes do vetor de campo elétrico  $\vec{E}$  são necessárias para sua caracterização. Podemos expressar suas componentes na forma

$$\vec{E} = \begin{pmatrix} E_x \\ E_y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A_x e^{i\gamma_x} \\ A_y e^{i\gamma_y} \end{pmatrix}, \quad (3.20)$$

sendo  $E_x$  a componente  $x$  do componente do campo elétrico e  $E_y$  a componente  $y$ . Estas são expressas pela amplitude  $A$  multiplicada pela fase  $e^{i\gamma}$ . Se estivermos somente interessados no estado de polarização, podemos utilizar vetores de polarização normalizados à unidade. Alguns exemplos de vetores de Jones (normalizados) podem ser encontrados na figura 3.6.

Os elementos óticos ativos do sistema são representados por matrizes  $2 \times 2$ . Por exemplo: um polarizador que polariza a luz linearmente na direção  $x$  tem por matriz de Jones

$$\mathbf{P} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}; \quad (3.21)$$

já um que polariza a luz na direção  $y$  tem por matriz de Jones

$$\mathbf{P} = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}. \quad (3.22)$$

O efeito de um meio birrefringente também pode ser representado por uma matriz de Jones, caso seus índices de refração permaneçam constantes e seu eixo ótico fique estático.

Para realizar o estudo de sistema, consideramos uma camada de um meio uniaxial de espessura  $d$ . Supomos que o eixo ótico é orientado na direção  $\vec{n}$  e um feixe de luz polarizada incide normalmente sobre o meio, formando um ângulo  $\theta$  com o eixo ótico.

Polarização	Vetor de Jones (normalizado)
	$\vec{E} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$
—	$\vec{E} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$
/	$\vec{E} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$
	$\vec{E} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -i \end{pmatrix}$
	$\vec{E} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix}$

Figura 3.6: Alguns exemplos de vetores de Jones.

Se o vetor campo elétrico do feixe estiver expresso em um referencial no qual suas componentes estejam orientadas na direção dos automodos (obtidos na seção 1.5), a direção de polarização permanecerá constante enquanto o feixe se propaga. Devido à birrefringência do meio, cada componente pode se propagar com uma velocidade distinta, produzindo uma diferença de fase entre elas.

A matriz  $G(\theta)$  que representa esse meio é dada por

$$\mathbf{G} = e^{-i\pi(n_{ef}(\theta)+n_o)} \begin{pmatrix} e^{-i\pi d(n_{ef}(\theta)-n_o)/\lambda} & 0 \\ 0 & e^{i\pi d(n_{ef}(\theta)-n_o)/\lambda} \end{pmatrix}, \quad (3.23)$$

sendo  $\lambda$  o comprimento de onda da luz,  $n_o$  o índice de refração ordinário e  $n_{ef}(\theta)$  o índice de refração efetivo dado pela expressão (1.30).

Caso estejamos interessados apenas na diferença de fase relativa entre as componentes, a matriz pode ser simplificada para

$$\mathbf{G} = \begin{pmatrix} e^{-i\pi d(n_{ef}(\theta)-n_o)/\lambda} & 0 \\ 0 & e^{i\pi d(n_{ef}(\theta)-n_o)/\lambda} \end{pmatrix}. \quad (3.24)$$

A polarização do feixe emergente pode ser obtida pela operação

$$\vec{E}_f = \mathbf{G}(\theta) \cdot \vec{E}_0, \quad (3.25)$$

em que  $\vec{E}_0$  é o campo elétrico do feixe incidente e  $\vec{E}_f$  o do emergente.

Em cristais líquidos, é comum que as componentes do vetor de polarização sejam expressas em um referencial arbitrário, que, por sua vez, formam um ângulo  $\phi$  com a projeção do eixo ótico no plano de polarização.

Nesse caso, precisamos rotacionar o eixo de referência original por um ângulo  $\phi$  para que seus eixos coincidam com as direções dos automodos. A matriz  $R(\phi)$  que faz essa rotação é definida por

$$\mathbf{R}(\phi) = \begin{pmatrix} \cos \phi & -\text{sen} \phi \\ \text{sen} \phi & \cos \phi \end{pmatrix}. \quad (3.26)$$

Para fazer a rotação de volta para o referencial inicial, utilizamos a matriz inversa de  $\mathbf{R}(\phi)$ , que chamamos de  $\mathbf{R}^{-1}(\phi)$ , dada por<sup>2</sup>.

$$\mathbf{R}^{-1}(\phi) = \begin{pmatrix} \cos \phi & \text{sen} \phi \\ -\text{sen} \phi & \cos \phi \end{pmatrix}. \quad (3.27)$$

Com essas equações, podemos calcular a diferença de fase provocada por um meio uniaxial em um feixe luminoso com incidência normal. Se  $\vec{E}$  for o vetor de polarização do feixe incidente, o emergente  $\vec{E}_f$  pode ser escrito como

$$\vec{E}_f = \mathbf{R}^{-1}(\phi) \cdot \mathbf{G}(\theta) \cdot \mathbf{R}(\phi) \cdot \vec{E}_0. \quad (3.28)$$

Como desprezamos todos os efeitos de reflexões, difrações e absorções de luz, o feixe emergente possui a mesma intensidade do incidente.

Caso adicionemos mais elementos óticos ao sistema, como os polarizados, a intensidade do feixe luminoso pode ser alterada. Nesse caso, ela pode ser obtida pela equação

$$I = \vec{E} \cdot \vec{E}^* \quad (3.29)$$

---

<sup>2</sup>Em algumas referências, as definições de  $R(\phi)$  e  $R^{-1}(\phi)$  são invertidas [2]

Se iniciarmos o problema com o vetor de polarização normalizado à unidade, a equação acima irá nos fornecer a fração do feixe que atravessou o elemento ótico sem ser absorvido ou dispersado.

### 3.3.2 Método de Jones em meios com parâmetros variáveis

Na seção acima, descrevemos como utilizar o método de Jones em situações em que o vetor de polarização e o de propagação possuem um ângulo arbitrário em relação ao eixo ótico. Esse método é aplicável a qualquer meio uniaxial em que os índices de refração permaneçam constantes e o eixo ótico fique estático.

Em cristais líquidos, o eixo ótico é determinado pelo diretor  $\vec{n}$  e é comum haver situações em que o diretor apresenta deformações espaciais. Para algumas situações, o método de Jones ainda pode ser adaptado para obter a transmitância analiticamente. Contudo, para o escopo deste trabalho, desenvolver o método numericamente é suficiente<sup>3</sup>.

Consideremos uma célula de cristal líquido na forma de *slab* com as mesmas propriedades descritas na seção 3.2. Novamente dividimos a espessura do *slab* em  $N$  pedaços de mesmo tamanho  $\Delta x$  dado pela expressão (3.1). Se os pedaços forem pequenos o suficiente, poderemos admitir que, nesse intervalo  $\Delta x$ , as propriedades do meio permanecem constantes.

Dessa forma, cada camada se comporta como um elemento ótico independente. A polarização final do feixe de luz pode ser obtida aplicando sucessivamente as matrizes de Jones que representam cada camada.

Os ângulos  $\theta$  e  $\phi$  nas camadas de número  $i$  são representados como  $\theta_i$  e  $\phi_i$ . Assim, as matrizes de rotação são

$$\mathbf{R}(\phi_i) = \begin{pmatrix} \cos \phi_i & -\text{sen} \phi_i \\ \text{sen} \phi_i & \cos \phi_i \end{pmatrix} \quad (3.30)$$

e

$$\mathbf{R}^{-1}(\phi_i) = \begin{pmatrix} \cos \phi_i & \text{sen} \phi_i \\ -\text{sen} \phi_i & \cos \phi_i \end{pmatrix}, \quad (3.31)$$

e a matriz de cada elemento ótico é

$$\mathbf{G} = \begin{pmatrix} e^{-i\pi d(n_{ef}(\theta_i) - n_o)\Delta x/\lambda} & 0 \\ 0 & e^{i\pi d(n_{ef}(\theta_i) - n_o)\Delta x/\lambda} \end{pmatrix}. \quad (3.32)$$

Aplicando as matrizes de Jones para cada camada, obtemos

$$\begin{aligned} \vec{E}_f &= \mathbf{R}^{-1}(\phi_n) \cdot \mathbf{G}(\theta_N) \cdot \mathbf{R}(\phi_N) \cdots \mathbf{R}^{-1}(\phi_2) \cdot \mathbf{G}(\theta_2) \cdot \mathbf{R}(\phi_2) \cdot \mathbf{R}^{-1}(\phi_1) \cdot \mathbf{G}(\theta_1) \cdot \mathbf{R}(\phi_1) \cdot \vec{E}_0 \\ &= \prod_{i=1}^N \mathbf{R}^{-1}(\phi_i) \cdot \mathbf{G}(\theta_i) \cdot \mathbf{R}(\phi_i) \cdot \vec{E}_0 \end{aligned} \quad (3.33)$$

Por fim, caso queiramos encontrar a transmitância em uma célula de cristal líquido com polarizadores cruzados, precisamos incorporar os efeitos de ambos na equação (3.33). Chamamos o primeiro polarizador de  $\mathbf{P}$  e o segundo de analisador  $\mathbf{A}$ . O vetor de campo elétrico do feixe emergente é dado por

<sup>3</sup>O leitor interessado pode encontrar mais informações sobre aplicação analítica em [2, 21, 26].

$$\vec{E}_f = \mathbf{A} \cdot \mathbf{R}^{-1}(\phi_n) \cdot \mathbf{G}(\theta_N) \cdot \mathbf{R}(\phi_N) \cdots \mathbf{R}^{-1}(\phi_1) \cdot \mathbf{G}(\theta_1) \cdot \mathbf{R}(\phi_1) \cdot \mathbf{P} \cdot \vec{E}. \quad (3.34)$$

E a intensidade do feixe resultante pode ser calculada utilizando a equação (3.29).

A transmitância pode ser obtida conhecendo os valores de  $\theta_i$  e  $\phi_i$ . No caso aqui estudado, o valor de  $\phi_i$  é constante e pode ser escolhido livremente. Utilizamos  $\phi_i = 45^\circ$  para obter o máximo de transmitância com a intensidade normalizada à unidade. Os valores de  $\theta_i$  podem ser calculados utilizando o algoritmo descrito na seção 3.2.

Para obter a transmitância em função do tempo, foi incluída a sub-rotina `transmitancia` no algoritmo `frank_solver.f90`, em que ela é executada em intervalos de tempo fixos. Alguns resultados obtidos por esse algoritmo são apresentados abaixo.

A transmitância da célula depende da diferença de fase do feixe de luz e, no caso da célula de VA, depende do ângulo  $\beta$  entre o diretor e o polarizador. A diferença de fase, por sua vez, depende dos índices de refração do cristal líquido, da espessura da célula, da orientação do diretor e do comprimento de onda do feixe.

Como utilizamos apenas um cristal líquido nas simulações, os índices de refração são mantidos fixos nos valores informados na tabela 3.1, que pode ser encontrada no capítulo 4. O ângulo azimutal do diretor é mantido fixo em  $\beta = 45^\circ$  em todas as simulações e o comprimento de onda também é mantido fixo em  $\lambda = 550nm$ . Assim, a forma dos gráficos de transmitância ótica é determinada pela orientação do diretor e pela espessura da célula.

Iniciamos, aqui, analisando a transmitância ótica da célula com a voltagem aplicada. O comportamento esperado nessa situação é bem conhecido e pode ser utilizado para avaliar a qualidade do algoritmo desenvolvido. Na figura 3.7, podemos visualizar os resultados desse processo.

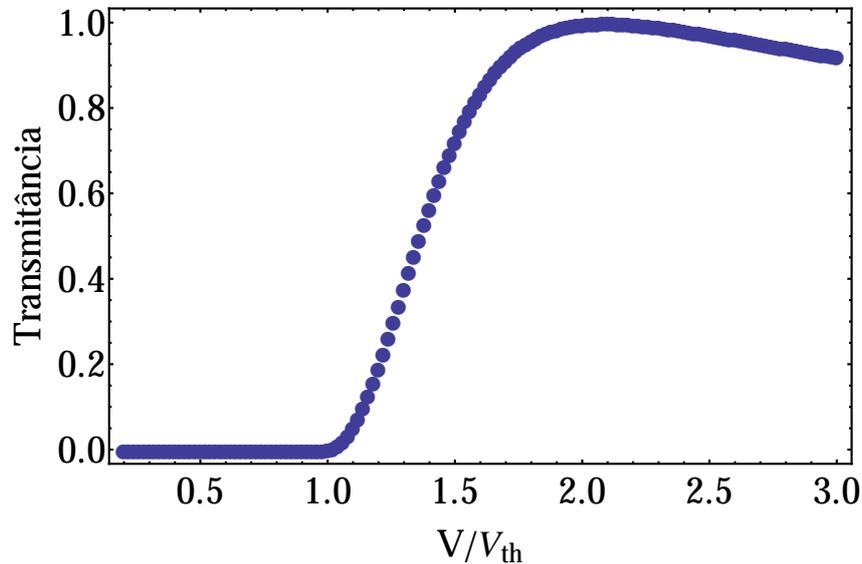


Figura 3.7: Transmitância no estado estacionário por voltagem para uma célula de cristal líquido. Para as simulações foram utilizados os parâmetros  $\theta_s = 0.01^\circ$ ,  $\lambda = 550nm$ ,  $W = 10^{-3} J/m^2$  e  $d = 5 \mu m$ .

Como esperado, para diferenças de potencial abaixo da voltagem crítica, a célula de cristal líquido não apresenta transmitância. A partir da voltagem crítica, a transmitância aumenta até o primeiro máximo e começa a decrescer. Esse tipo de curva é muito comum

na literatura, um exemplo pode ser visto na figura 3.8. Observe que, embora essa curva utilize um cristal líquido com parâmetros diferentes dos utilizados neste trabalho, as curvas de transmitância apresentam o mesmo formato característico.

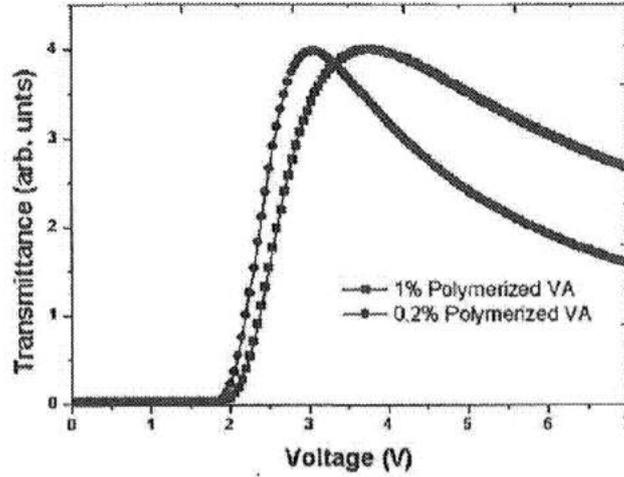


Figura 3.8: Transmitância ótica por diferença de potencial. Figura obtida da referência [29].

Como último teste, analisamos como é o comportamento da transmitância da célula em função do tempo durante o processo de subida e relaxamento.

Como a espessura da célula é mantida constante para cada simulação, obtemos dois comportamentos característicos: quando a espessura e as deformações do diretor são pequenas, o transiente de transmitância tem a forma da figura 3.9. Nesse caso, o sistema é removido do equilíbrio e o diretor começa a variar. Conforme ele se deforma, a transmitância aumenta monotonicamente até atingir o máximo no estado estacionário. Então, a diferença de potencial é removida e o sistema relaxa novamente até o equilíbrio. Nesse processo, a transmitância decai monotonicamente até um valor próximo de 0.

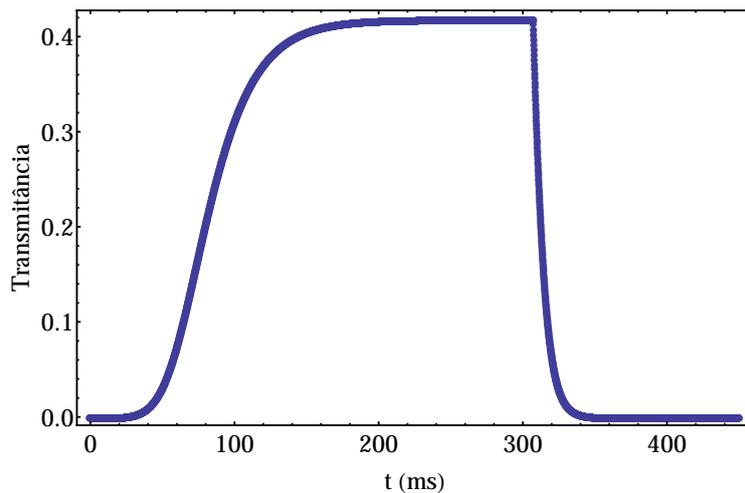


Figura 3.9: Transmitância vs tempo para  $V/V_{th} = 1.2$ ,  $\theta_s = 2^\circ$ ,  $v = 1.0$ ,  $d = 4\mu m$  e  $W = 10^{-4} J/m^2$ .

Já quando a espessura da célula ou as deformações do diretor forem grandes, o transiente de transmitância pode apresentar a forma da figura 3.10. Nesse caso, as deformações

do diretor podem causar diferenças de fase superiores a  $90^\circ$ . Ao atingir esse valor de diferença de fase, a transmitância alcança em seu valor máximo (no caso normalizado, este valor é igual a 1) e, a partir dele, a transmitância começa a diminuir até a diferença de fase atingir  $180^\circ$ , quando ela volta a aumentar novamente.

Esse processo oscilatório se encerra quando o sistema atinge o estado estacionário. Removida a diferença de potencial, o sistema relaxa e a transmitância passa pelo mesmo número de máximos e mínimos do processo de subida.

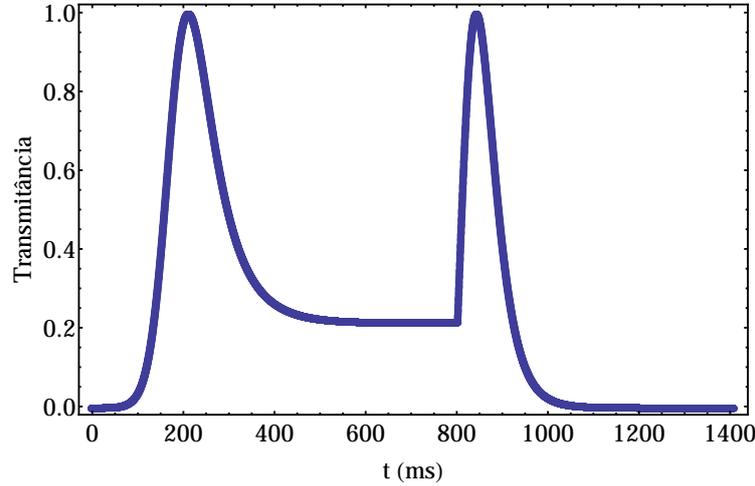


Figura 3.10: Transmitância por tempo para  $V/V_{th} = 1.6$ ,  $\theta_s = 2^\circ$ ,  $v = 1$ ,  $d = 10\mu m$  e  $W = 10^{-4} J/m^2$

### 3.4 Calculando os tempos de resposta do sistema

Resta aqui, encontrarmos os tempos de relaxamento do sistema com as informações disponíveis. O tempo de relaxamento ótico pode ser encontrado comparando os valores das intensidades intermediárias da transmitância ótica com a intensidade inicial. Para se obter maior precisão, utilizamos um algoritmo que realiza o processo de uma forma um pouco diferente. Separamos todos os pontos do último máximo até o fim do relaxamento e os ajustamos com uma curva polinomial. Com ela, procuramos o ponto onde a função possui 10% do valor inicial. A diferença entre o tempo inicial e o tempo nesse ponto é o tempo ótico  $T_{otc}$ .

Para encontrar o tempo de relaxamento de fase, primeiro convertemos a transmitância ótica em diferenças de fase. A relação entre essas grandezas é expressa pela equação (1.34). Invertendo essa função, obtemos

$$\delta(I) = 2\sqrt{\arcsin(I)} + m\pi, \quad \text{com} \quad m = 0, 1, 2, 3, 4, \dots \quad (3.35)$$

Podemos notar que a fase pode assumir valores superiores  $\pi$ , enquanto que a função  $\arcsin(x)$  é limitada em  $\pi$ . O fator  $m\pi$  é utilizado para corrigir esse problema.

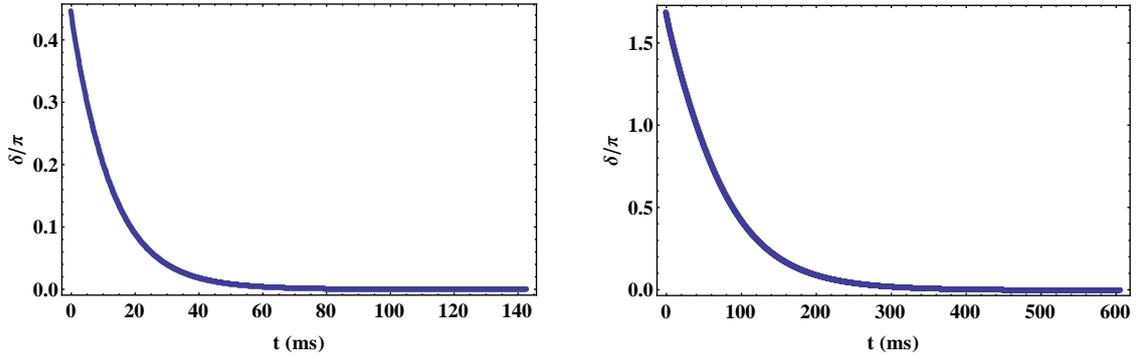
A aplicação da função (3.35) necessita de certos cuidados. Enquanto o comportamento da transmitância ótica for decrescente, devemos aplicar a função (3.35). Após o primeiro vale ( $\delta = \pi$ ), a fase continua decrescendo, porém, a transmitância começa a aumentar. Se aplicarmos a função  $\arcsin(x)$ , o valor estará errado. Para corrigir esse problema, utilizamos a função

$$\delta(I) = 2\sqrt{\arccos(I)} + m\pi, \quad \text{com} \quad m = 0, 1, 2, 3, 4, \dots \quad (3.36)$$

Essa função deve ser utilizada até o próximo pico, onde a função (3.35) é utilizada novamente.

Os valores de  $m$  são determinados pelos números de extremos da função. Ele se iniciam com o valor do número total de extremos e, para cada um que é encontrado, o valor de  $m$  deve ser decrescido de um. O algoritmo que realiza essas operações foi desenvolvido no *software* MATHEMATICA versão 9 e pode ser encontrado no apêndice A.

Como exemplo do procedimento, apresentamos o resultado para dois processos bem distintos. Nas figuras 3.11a e 3.11b, encontramos as curvas de diferença de fase por tempo obtidas dos transientes de transmitância ótica mostrados nas figuras 3.9 e 3.10.



(a) Diferença de fase por tempo para  $V/V_{th} = 1.2$ ,  $\theta_s = 2^\circ$ ,  $v = 1.0$ ,  $d = 4\mu\text{m}$  e  $w = 10^{-4} \text{ J/m}^2$ .  
(b) Diferença de fase por tempo para  $V/V_{th} = 1.6$ ,  $\theta_s = 2^\circ$ ,  $v = 1$ ,  $d = 10\mu\text{m}$  e  $W = 10^{-4} \text{ J/m}^2$

Figura 3.11: Diferença de fase em função do tempo para o processo de relaxamento.

Determinados os transientes de fase, eles são comparados com o valor inicial da fase para selecionar o ponto com o valor mais próximo de  $\delta_0/e^2$ . A diferença de tempo entre o instante do decaimento e o ponto selecionado é o tempo de decaimento de fase  $t_p$ . A rotina que realiza esse processo é parte do algoritmo citado acima.

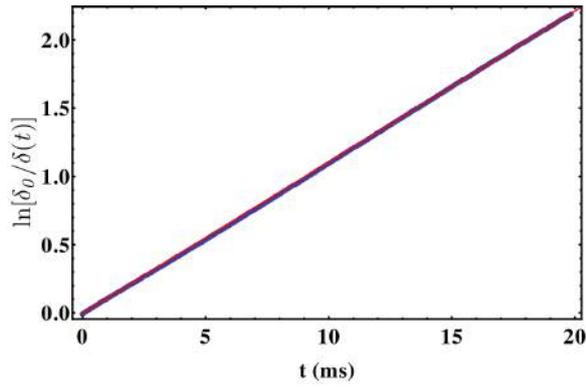
Com os valores da diferença de fase, também é possível encontrar os valores dos tempos moleculares caso algumas condições sejam satisfeitas. Se as variações do diretor forem pequenas, a aproximação (2.57) continua sendo válida e podemos construir o gráfico da função

$$\ln\left(\frac{\delta_0}{\delta(t)}\right) = t. \quad (3.37)$$

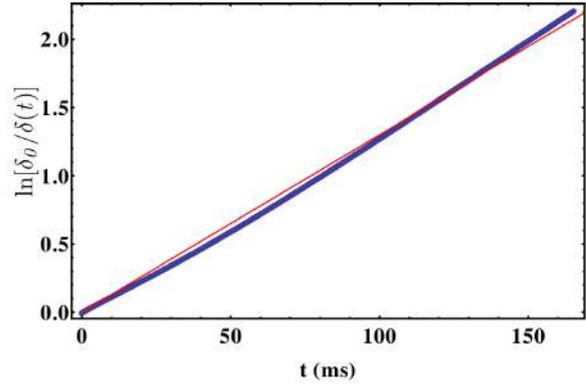
Dessa forma, obteremos uma reta cujo coeficiente angular é  $2\tau_0$  e, invertendo a fração, encontramos  $\tau_0$ . Alguns exemplos de curvas podem ser vistas na figura 3.12.

Podemos notar que, na curva 3.12c, o gráfico não forma uma reta. Isso ocorre porque a premissa para o decaimento exponencial é que as distorções sofridas pelo diretor sejam pequenas, o que nem sempre é verdade. Para altos valores de diferença de potencial e pequenos valores de ancoramento, os diretores apresentam grandes deformações.

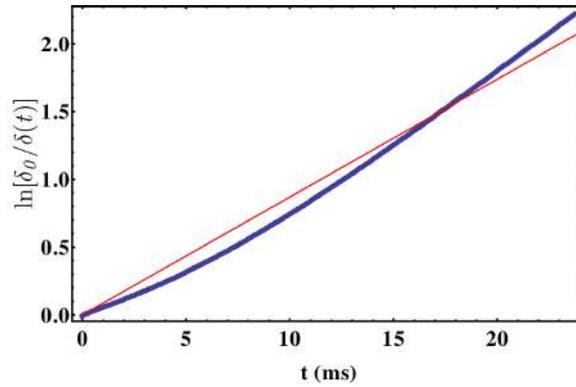
Embora o decaimento desvie um pouco do comportamento exponencial, a reta ainda apresenta uma aproximação razoável para tempos moleculares. Conhecendo esse fato, essa técnica ainda pode ser utilizada para estimar valores de  $\tau_0$  para diferenças de potencial elevadas.



(a) Gráfico para os parâmetros  $V_{th} = 1.05$ ,  $\theta_s = 2$ ,  $v = 0.5$ ,  $d = 3\mu m$  e  $W = 10^{-4} \text{ J/m}^2$



(b) Gráfico para os parâmetros  $V_{th} = 1.6$ ,  $\theta_s = 2$ ,  $v = 0.5$ ,  $d = 10\mu m$  e  $W = 6 \times 10^{-5} \text{ J/m}^2$



(c) Gráfico para os parâmetros  $V_{th} = 1.8$ ,  $\theta_s = 2$ ,  $v = 0.5$ ,  $d = 3\mu m$  e  $W = 6 \times 10^{-5} \text{ J/m}^2$ .

Figura 3.12: Gráficos de  $\ln[\delta_0/\delta(t)]$  por  $t$ .

Por fim, resta-nos comparar os tempos de resposta obtidos pelos métodos descritos nesse capítulo com algum valor conhecido na literatura. Na figura 3.13, podemos ver os tempos de relaxamento em função da espessura obtidos pelo método descrito nesse capítulo e, na figura inserida, os tempos de relaxamento obtidos experimentalmente [30]. Como as duas curvas apresentam comportamento muito próximos, podemos afirmar que o algoritmo proposto funciona bem.

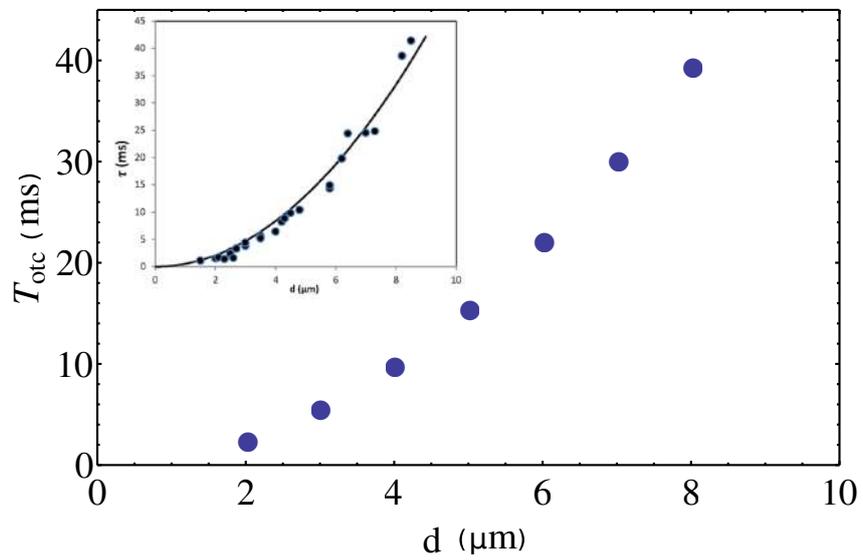


Figura 3.13: Tempos de relaxamento por espessura para ancoramentos fortes. Os valores da figura externa foram obtidos por meio de simulações pelos algoritmos propostos neste trabalho e a figura inserida foi obtida experimentalmente.

# Capítulo 4

## Análise dos resultados

Neste capítulo, apresentaremos os resultados dos cálculos numéricos e teóricos. A partir deles, será analisado como a variação dos parâmetros da célula de cristal líquido influencia o comportamento dos tempos de relaxação ótica, do diretor e da fase.

Para os parâmetros do cristal líquido, a menos que seja especificado o contrário, serão utilizados os do MLC6608 (Merck), que se encontram disponíveis na tabela 3.1 [28].

Em especial, serão realizadas análises mais detalhadas sobre a dependência da viscosidade de superfície. Para realizar análises quantitativas desse parâmetro sobre o sistema, faremos uso de dois tipos de tabelas: a de desvio relativo e a de desvio absoluto.

Na primeira, cujos valores são representamos por  $d_r$ , é calculado qual o desvio percentual que a variação do parâmetro de viscosidade de superfície causa no sistema, mantendo-se constante os demais parâmetros envolvidos. Os valores dessa tabela são calculados pela equação

$$d_r = \frac{(t_{coluna} - t_{linha})}{t_{linha}}, \quad (4.1)$$

sendo  $t_{coluna}$  o tempo de relaxamento obtido por meio da viscosidade de superfície informada pela coluna e  $t_{linha}$  o mesmo tempo, mas calculado a partir da viscosidade de superfície informada na linha.

Na tabela de desvio absoluto, cujos valores representamos por  $d_a$ , encontramos qual a variação de tempo em *ms* que ocorre quando variamos o parâmetro de viscosidade de superfície. Os valores dessa tabela são calculados pela equação

$$d_a = t_{coluna} - t_{linha}, \quad (4.2)$$

em que  $t_{coluna}$  e  $t_{linha}$  têm os mesmos significados que foram especificados para a tabela anterior.

### 4.1 Tempo de relaxamento do diretor $\tau_0$

#### 4.1.1 Comportamento em relação à espessura e ao ancoramento

Neste trabalho, utilizamos duas formas de calcular os tempos de decaimento do diretor. Na primeira, resolvemos a equação de Frank para situações em que as deformações do diretor são pequenas; na outra, desenvolvemos um conjunto de algoritmos capaz de resolver a equação de Frank e de obter o tempo de relaxamento do diretor.

Para o caso analítico, obtemos uma equação de autovalores e uma expressão que os relaciona com os tempos característicos do sistema. Essa expressão foi derivada em [31]. No entanto, essa é a primeira vez que a equação é utilizada para obter o tempo de relaxação em função da viscosidade de superfície, da energia de ancoramento e da espessura.

Para relembrar essa expressão obtida no capítulo 2, a equação de autovalor tem a forma

$$[-k_n^2 + (u_+ - vk_n^2)(u_- - vk_n^2)] \text{sen}(k_n) + k_n(u_+ + u_- - 2vk_n^2) \text{cos}(k_n) = 0, \quad (4.3)$$

sendo  $u_{\pm} = W_{\pm}d/K$  e  $v = \gamma_s/\gamma_1d$ . Com os valores  $k_n$ , os tempos de relaxamento do diretor são obtidos pela expressão

$$\tau_n = \frac{\gamma_1 d^2}{K k_n^2}. \quad (4.4)$$

Também é importante lembrar que, embora haja infinitas soluções para a equação 4.3, cada tipo de deformação relaxa independentemente das demais. Dessa forma, o tempo de relaxação é determinado por aquele que tem maior duração ( $\tau_0$ ). Pela equação (4.4), podemos constatar que o tempo de relaxação mais lento é o associado ao menor autovalor, que geralmente é o primeiro.

Na literatura, essa expressão é a mais completa que existe. Ela engloba os dois tipos de ancoramento (forte e fraco), a viscosidade de superfície e, ainda, o caso em que as energias de ancoramento possuem valores diferentes em cada substrato.

Para a realização deste trabalho, consideramos apenas o caso em que a energia de ancoramento é igual nos dois substratos. Matematicamente, isso é equivalente a fazer  $W_+ = W_- = W$  e, conseqüentemente,  $u_+ = u_- = u$ . Assim, obtemos a expressão

$$\left[-k_n^2 + (u - vk_n^2)^2\right] \text{sen}(k_n) + 2k_n(u - vk_n^2) \text{cos}(k_n) = 0, \quad (4.5)$$

que, ainda, é bastante geral.

Os autovalores da equação (4.5) podem ser encontrados por um método numérico usual. Podemos ver alguns exemplos na figura 4.1, em que cada ponto onde as duas curvas se cruzam é um autovalor do sistema. Observamos que o primeiro autovalor possui um tempo característico superior aos demais.

Utilizando a expressão (4.4), podemos substituir a variável adimensional  $k_n$  da equação (4.5) por um termo que depende dos parâmetros do cristal líquido e do tempo de relaxamento na forma

$$k_n = \frac{\alpha}{\sqrt{\tau_n}}, \quad (4.6)$$

em que  $\alpha = \sqrt{\gamma_1/K}d$ . Substituindo a equação acima em (4.3), temos que

$$\left[-\frac{\alpha^2}{\tau_n} + \left(u - v\frac{\alpha^2}{\tau_n}\right)^2\right] \text{sen}\left(\frac{\alpha}{\sqrt{\tau_n}}\right) + 2\frac{\alpha}{\sqrt{\tau_n}}\left(u - v\frac{\alpha^2}{\tau_n}\right) \text{cos}\left(\frac{\alpha}{\sqrt{\tau_n}}\right) = 0, \quad (4.7)$$

A partir da expressão (4.7), podemos obter os tempos de relaxação para situações mais simples como casos limites. Se fizermos  $v = 0$  e  $\alpha/\sqrt{\tau_n} = \beta d$ , podemos escrever

$$[-(\beta d)^2 + u^2] \text{sen}(\beta d) + 2\beta d u \text{cos}(\beta d) = 0, \quad (4.8)$$

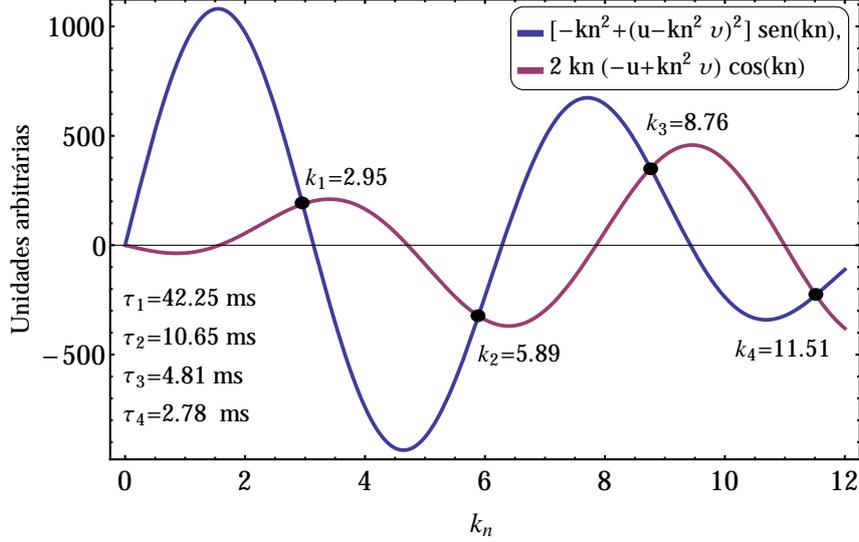


Figura 4.1: Autovalores e tempo característico associado obtidos para os parâmetros  $W = 10^{-4} \text{ J/m}^2$ ,  $d = 6 \mu\text{m}$  e  $v = 0.1$ .

e

$$\tau = \frac{\gamma_1}{K\beta^2}. \quad (4.9)$$

Substituindo  $u = Wd/K$  em (4.8), obtemos, após realizar alguns cálculos algébricos,

$$\tan(\beta d) = \frac{2W/(K\beta)}{1 - [W/(K\beta)]^2}, \quad (4.10)$$

que é exatamente o resultado encontrado na referência [28], em que é apresentada uma equação sem viscosidade de superfície.

Se fizermos  $v = 0$ , também podemos escrever a equação (4.7) na forma

$$\tan\left(\frac{\alpha}{\sqrt{\tau_n}}\right) = \frac{\frac{2\alpha u}{\sqrt{\tau_n}}}{\left(\frac{\alpha^2}{\tau_n} - u^2\right)}, \quad (4.11)$$

e se fizermos  $W \ll 1$ , teremos  $u \ll 1$ ; portanto,  $\tan(\alpha/\sqrt{\tau_0}) \approx 0$ . Assim, podemos aproximar  $\tan(\alpha/\sqrt{\tau_n}) \approx \alpha/\sqrt{\tau_0}$  e obter, após algumas operações matemáticas,

$$\tau_0 = \frac{\alpha^2 u}{u^2 + 2}, \quad (4.12)$$

e, como  $u$  é muito pequeno, podemos desprezar o termo  $u^2$ . Substituindo as definições de  $\alpha$  e  $u$ , obtemos, então,

$$\tau_0 \approx \frac{\gamma_1 d}{2W}. \quad (4.13)$$

Quando o ancoramento é muito fraco e a viscosidade de superfície é nula, os tempos de relaxamento do diretor aumentam linearmente com a espessura  $d$ .

No caso de o ancoramento ser do tipo forte, teremos  $W \rightarrow \infty$  e, conseqüentemente,  $u \rightarrow \infty$ . Assim, podemos simplificar a equação (4.7) para

$$\tan\left(\frac{\alpha}{\sqrt{\tau_n}}\right) + \frac{1}{u} = 0, \quad (4.14)$$

logo,

$$\tan\left(\frac{\alpha}{\sqrt{\tau_n}}\right) = 0. \quad (4.15)$$

Essa equação é satisfeita quando

$$\frac{\alpha}{\sqrt{\tau_n}} = n\pi \quad \text{com} \quad n = 1, 2, 3, 4, 5\dots \quad (4.16)$$

O tempo de relaxação do sistema é dado pelo maior tempo característico. Nesse caso, isso é obtido quando  $n = 1$ . Substituindo as definições de  $u$  e  $\alpha$  em (4.16) e fazendo  $n = 1$ , podemos escrever o tempo de relaxação como

$$\tau_0 = \frac{\alpha^2}{\pi^2} = \frac{\gamma_1}{K} \left(\frac{d}{\pi}\right)^2, \quad (4.17)$$

que é a expressão encontrada em diversos livros didáticos, em que  $\tau_0 \propto d^2$  [2, 7, 26].

Ainda não há na literatura uma expressão que permita estimar os tempos de relaxação do diretor explicitamente e considerando a viscosidade de superfície. Para avaliar em quais situações esse parâmetro é efetivo, comparamos os resultados, obtidos com modelos convencionais. Pela diferença entre os resultados, podemos avaliar em quais situações ela não pode ser desprezada.

Na referência [28], encontramos duas aproximações para tempos de relaxamento do diretor no caso de ancoramento finito. Uma delas é obtida resolvendo analiticamente a equação de Frank e desprezando o termo de viscosidade de superfície. Esse modelo tem como solução a equação de autovalores (4.10), em que os tempos de relaxamento são dados pela expressão (4.9). Como demonstrado acima, esse modelo pode ser obtido da equação (4.5), fazendo  $v = 0$ .

A segunda expressão foi obtida substituindo na equação de tempos de relaxamento do diretor para ancoramentos fortes ( $\tau_0 = \gamma_1 d^2 / (K\pi^2)$ ) o comprimento real da célula  $d$  pelo comprimento efetivo  $d + 2L$ . Realizando essa operação e cancelando o termo  $4K^2/W^2$ , temos que

$$\tau_0 = \frac{\gamma_1}{K\pi^2} \left(d^2 + \frac{4dK}{W}\right). \quad (4.18)$$

Observe que, em todos esses modelos, a célula não pode apresentar *pretilt* e a voltagem não pode estar muita acima da voltagem crítica.

Na tabela 4.1, encontramos os valores dos tempos de relaxamento do diretor calculados teoricamente pelos modelos de espessura efetiva (equação (4.18)) e com a equação (4.5) para diferentes viscosidades, entre elas, a viscosidade nula (equivalente ao modelo obtido na referência [28]). Também, encontramos, na tabela 4.1, valores calculados numericamente pelo conjunto de algoritmos descritos no capítulo 3.

Embora seja possível obter modelos teóricos nos quais pode haver relaxamento sem *pretilt* algum, numericamente é necessário adicionar um valor de *pretilt* para o algoritmo permanecer estável. Para tanto, em todos os casos numéricos da tabela 4.1, utilizamos  $\theta_s = 0.01^\circ$ . Esse é um valor grande o suficiente para o algoritmo permanecer estável e pequeno o suficiente para não exercer influência considerável nos tempos de resposta.

Numericamente, também temos que escolher um valor para a diferença de potencial. Escolhemos o valor  $V = 1.05V_{th}$  por ser um valor grande o suficiente para induzir a transição de Fréederickzs e pequeno o bastante para não influenciar substancialmente os tempos característicos do sistema.

Para o ancoramento forte, as três formas produzem resultados muito próximos, independentemente da espessura da célula. Como demonstrado, quando o ancoramento é muito alto, todos os modelos culminam na mesma equação, o que justifica a proximidade dos resultados.

Nesse regime, os modelos que apresentam viscosidade de superfície não demonstram variações expressivas nesse parâmetro. Quando o ancoramento é do tipo forte, o diretor não varia na superfície. Se não há reorientação, então, a viscosidade de superfície não atua nesse processo, o que justifica os resultados apresentados. Convém lembrar que as pequenas variações ocorrem porque o ancoramento é aproximadamente forte (ele teria que ser infinito para ser realmente forte).

Conforme diminuimos o ancoramento, a diferença entre os modelos ficam mais evidentes, especialmente para pequenas espessuras. A razão dessas divergências é que, quanto menor a espessura, menor a distância entre as interfaces e o volume do material. Por isso, aqui, a modelagem da superfície é mais determinante.

Para viscosidades nulas, ambos os modelos teóricos apresentam resultados muito próximos. Conforme aumenta a viscosidade para o modelo descrito pela equação (4.5), as divergências nos resultados ficam bem evidentes.

Em relação aos valores simulados, o modelo de espessura efetiva apresenta divergências expressivas para pequenas espessuras, mesmo quando comparado com resultados para pequenas viscosidades. Os resultados obtidos pela equação (4.5) também apresentam divergências em relação aos resultados numéricos nesse regime.

Quando as espessuras são pequenas, as deformações do diretor ocorrem em regiões pequenas. Nessas situações, a derivada primeira do diretor possui valor elevado, assim, as aproximações para pequenas derivadas apresentam erros maiores do que quando a espessura é grande.

Outro fato digno de nota é que a dependência dos tempos de relaxamento do diretor em relação à viscosidade de superfície não é muito afetada pela espessura da célula para o intervalo estudado.

Podemos analisar o efeito dessas variações nos tempos de resposta por meio das tabelas de desvio relativo. Como é evidente que, para ancoramentos fortes, as variações são desprezíveis, apresentamos resultados apenas para o caso de ancoramento fraco. Eles podem ser visualizados no conjunto de tabelas 4.2.

Para pequenas espessuras e ancoramentos fracos, a dependência dos tempos de resposta em relação à viscosidade de superfície é muito forte. Esses efeitos são atenuados conforme a espessura aumenta.

Por fim, a referência [28] sugere que os tempos de resposta seguem uma lei de potência em relação à espessura na forma  $d^b$ . Para ancoramentos fortes, temos que  $b \approx 2$  e  $b \approx 1$  para ancoramentos fracos. Resta-nos investigar como a viscosidade de superfície influencia esse expoente.

Na figura 4.2, mostramos os tempos de resposta numéricos em função da espessura para diferentes ancoramentos e viscosidades de superfície. No mesmo gráfico, também foi mostrado o ajuste da curva  $f(d) = ad^b$ .

Podemos observar que, para ancoramentos altos, o expoente  $b$  é muito próximo de 2 e praticamente invariante em relação a  $v$ .

$\tau_0 : Ef$		$\tau_0 : \text{Teóricos}$					$\tau_0 : \text{Simulados}$			
d	*	v=0	v=0.1	v=0.5	v=1.0	v=1.5	v=0.1	v=0.5	v=1.0	v=1.5
2.	4.32	4.32	4.32	4.32	4.33	4.34	4.4	4.4	4.41	4.42
3.	9.6	9.6	9.6	9.61	9.61	9.62	9.76	9.77	9.77	9.78
4.	16.96	16.96	16.96	16.97	16.98	16.98	17.23	17.24	17.24	17.25
5.	26.41	26.41	26.41	26.42	26.42	26.43	26.82	26.82	26.83	26.83
6.	37.94	37.94	37.94	37.94	37.95	37.96	38.51	38.51	38.52	38.52
7.	51.55	51.55	51.55	51.55	51.56	51.57	52.3	52.31	52.32	52.32
8.	67.24	67.24	67.24	67.25	67.25	67.26	68.21	68.22	68.22	68.23
9.	85.02	85.02	85.02	85.02	85.03	85.04	86.23	86.24	86.24	86.25
10.	104.87	104.88	104.88	104.88	104.89	104.9	106.36	106.36	106.37	106.38

(a)  $W = 10^{-3} \text{J/m}^2$ 

$\tau_0 : Ef$		$\tau_0 : \text{Teóricos}$					$\tau_0 : \text{Simulados}$			
d	*	v=0	v=0.1	v=0.5	v=1.0	v=1.5	v=0.1	v=0.5	v=1.0	v=1.5
2.	5.67	5.78	5.91	6.48	7.5	8.82	6.4	6.9	7.36	7.71
3.	11.63	11.74	11.92	12.51	13.55	15.	12.52	13.03	13.49	13.83
4.	19.67	19.79	20.01	20.6	21.61	23.	20.77	21.28	21.77	22.12
5.	29.8	29.92	30.19	30.78	31.74	33.03	31.13	31.65	32.16	32.54
6.	42.01	42.13	42.47	43.05	43.97	45.17	43.6	44.12	44.66	45.07
7.	56.3	56.42	56.83	57.41	58.3	59.43	58.18	58.71	59.26	59.7
8.	72.67	72.79	73.29	73.87	74.73	75.8	74.86	75.4	75.97	76.43
9.	91.12	91.25	91.85	92.42	93.26	94.28	93.66	94.2	94.79	95.27
10.	111.66	111.79	112.5	113.06	113.89	114.87	114.56	115.11	115.71	116.21

(b)  $W = 10^{-4} \text{J/m}^2$ 

$\tau_0 : Ef$		$\tau_0 : \text{Teóricos}$					$\tau_0 : \text{Simulados}$			
d	*	v=0	v=0.1	v=0.5	v=1.0	v=1.5	v=0.1	v=0.5	v=1.0	v=1.5
2.	6.68	6.92	7.22	8.6	10.89	13.53	8.48	9.97	11.45	12.94
3.	13.14	13.42	13.78	15.34	18.08	21.53	15.09	16.49	17.79	19.11
4.	21.68	21.98	22.4	24.03	26.92	30.77	23.89	25.28	26.56	27.81
5.	32.31	32.62	33.1	34.75	37.65	41.58	34.8	36.2	37.49	38.71
6.	45.02	45.34	45.89	47.54	50.38	54.19	47.84	49.26	50.58	51.79
7.	59.81	60.14	60.77	62.42	65.18	68.77	62.99	64.42	65.79	66.98
8.	76.69	77.02	77.74	79.38	82.06	85.41	80.26	81.7	83.11	84.28
9.	95.64	95.98	96.81	98.43	101.05	104.13	99.63	101.08	102.53	103.68
10.	116.68	117.03	117.96	119.58	122.13	124.95	121.11	122.57	124.06	125.18

(c)  $W = 6 \times 10^{-5} \text{J/m}^2$ 

Tabela 4.1: Comparação entre os tempos obtidos para: comprimento efetivo, valores teóricos calculados com a equação (4.5) e calculados numericamente. Para obter os resultados numéricos, utilizamos  $V = 1.05V_{th}$  e  $\theta_s = 0.01^\circ$ . Na tabela  $Ef$ , significa Espessura efetiva.

	v=0.1	v=0.5	v=1.0	v=1.5		v=0.1	v=0.5	v=1.0	v=1.5
v=0.1	0.	9.27%	17.9%	24.86%	v=0.1	0%	4.03%	7.74%	10.54%
v=0.5	-8.49%	0%	7.9%	14.26%	v=0.5	-3.87	0.	3.57	6.27
v=1.0	-15.18%	-7.32%	0.	5.9%	v=1.0	-7.18%	-3.44%	0%	2.61%
v=1.5	-19.91%	-12.48%	-5.57	0%	v=1.5	-9.54%	-5.9%	-2.54%	0%

(a)  $d = 3 \mu\text{m}$ (b)  $d = 5 \mu\text{m}$ 

	v=0.1	v=0.5	v=1.0	v=1.5		v=0.1	v=0.5	v=1.0	v=1.5
v=0.1	0%	2.27%	4.44%	6.07%	v=0.1	0%	1.46%	2.91%	4.01%
v=0.5	-2.22%	0%	2.12%	3.72%	v=0.5	-1.44%	0%	1.43%	2.52%
v=1.0	-4.25%	-2.08%	0%	1.56%	v=1.0	-2.83%	-1.41%	0%	1.07%
v=1.5	-5.72%	-3.58%	-1.54%	0%	v=1.5	-3.86%	-2.45%	-1.06%	0%

(c)  $d = 7 \mu\text{m}$ (d)  $d = 9 \mu\text{m}$ 

Tabela 4.2: Tabelas contendo os desvios relativos dos tempos de relaxamento do diretor em relação à viscosidade de superfície. Os valores da tabela foram simulados utilizando os parâmetros  $\theta_s = 0.01^\circ$ ,  $W = 6 \times 10^{-5} \text{J}/\text{m}^2$  e  $V = 1.05 V_{th}$ .

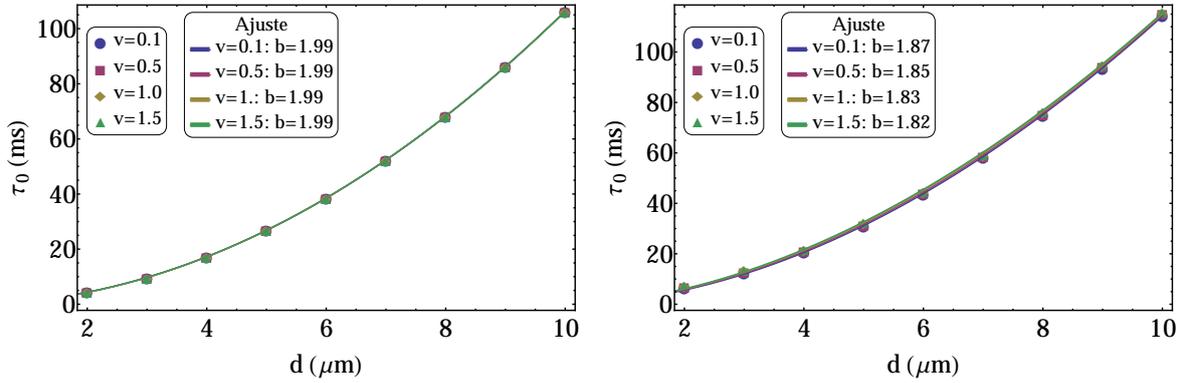
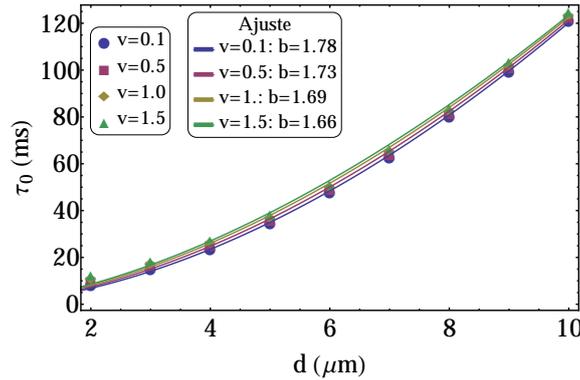
(a)  $W = 10^{-3} \text{J}/\text{m}^2$ (b)  $W = 10^{-4} \text{J}/\text{m}^2$ (c)  $W = 6 \times 10^{-5} \text{J}/\text{m}^2$ 

Figura 4.2: Tempos de relaxação do diretor por espessura e ajuste desses tempos pela curva  $f(d) = ad^b$ . Para realizar essas simulações, foram utilizados os parâmetros  $v_{th} = 1.05$  e  $\theta_s = 0.01$

Para ancoramentos mais fracos, a viscosidade de superfície reduz o valor do expoente consideravelmente. Observe que, para  $W = 6 \times 10^{-5} \text{J}/\text{m}^2$ , temos uma variação de  $b = 1.78$

para  $b = 1.65$ .

Para baixas viscosidades, os expoentes encontrados concordam muito bem com aqueles encontrados na referência [28]; esses utilizam o modelo em que a viscosidade de superfície é considerada nula.

### 4.1.2 Comportamento em relação ao *pretilt*

Em relação ao *pretilt*, há na literatura, um modelo que permite estimar os tempos de resposta para ancoramento forte quando se conhece o ângulo máximo do diretor. Nele, os tempos de relaxamento são dados por [32]

$$\tau_0 = \frac{\gamma_1}{K\beta^2}, \quad (4.19)$$

em que  $\beta = \frac{2}{d} \arccos\left(\frac{\theta_s}{\theta_m}\right)$ ,  $\theta_s$  é o ângulo de *pretilt* e  $\theta_m$  o ângulo  $\theta$  no centro do *slab*. Observe que, embora essa seja uma expressão analítica, os valores de  $\theta_m$ , em geral, são obtidos numericamente.

Como a equação (4.5) não é sensível a variações de *pretilt*, ela não pode ser utilizada nessa comparação. Os resultados para esse modelo e os valores calculados numericamente podem ser visualizados nas tabelas 4.3.

d	$\tau_0(\beta)$	$\tau_0(v=0.1)$	d	$\tau_0(\beta)$	$\tau_0(v=0.1)$	d	$\tau_0(\beta)$	$\tau_0(v=0.1)$
2.	4.38	4.83	2.	4.73	5.36	2.	5.03	5.95
3.	9.88	10.73	3.	10.67	11.92	3.	11.36	13.26
4.	17.57	18.94	4.	19.	21.06	4.	20.24	23.44
5.	27.48	29.47	5.	29.72	32.79	5.	31.66	36.5
6.	39.58	42.32	6.	42.82	47.1	6.	45.63	52.45
7.	53.89	57.49	7.	58.31	63.99	7.	62.14	71.27
8.	70.4	74.97	8.	76.19	83.47	8.	81.2	92.97
9.	89.12	94.78	9.	96.45	105.54	9.	102.81	117.55
10.	110.04	116.9	10.	119.11	130.18	10.	126.95	145.01

(a)  $\theta_s = 1^\circ$                       (b)  $\theta_s = 3^\circ$                       (c)  $\theta_s = 5^\circ$

Tabela 4.3: Comparação entre modelos que aceitam  $\theta_s \neq 0$ . Para a simulação, consideramos  $W = 10^{-3} \text{ J/m}^2$  e  $V = 1.05 V_{th}$ .

Para o cálculo de  $\beta$  utilizado na equação (4.19), são necessários os valores de  $\theta_m$  que só são possíveis de serem calculados numericamente. Para tanto, utilizamos o algoritmo descrito na seção 3.2.

Analisando os resultados podemos notar que há uma divergência razoável entre o modelo teórico e os valores numéricos, mas estes quase não variam quando alteramos a viscosidade de superfície.

Também é esperado que o tempo de relaxamento do diretor varie linearmente em relação ao ângulo de *pretilt* [32]. Para investigar os valores desse expoente nesse e nos demais regimes de ancoramento, também mostramos o ajuste da curva  $f(x) = ax^b + c$ . Os resultados podem ser vistos nas figuras 4.3 e 4.4.

Analisando os resultados simulados, constatamos que os tempos de resposta variam de forma aproximadamente linear com o *pretilt*, tal como havia sido previsto.

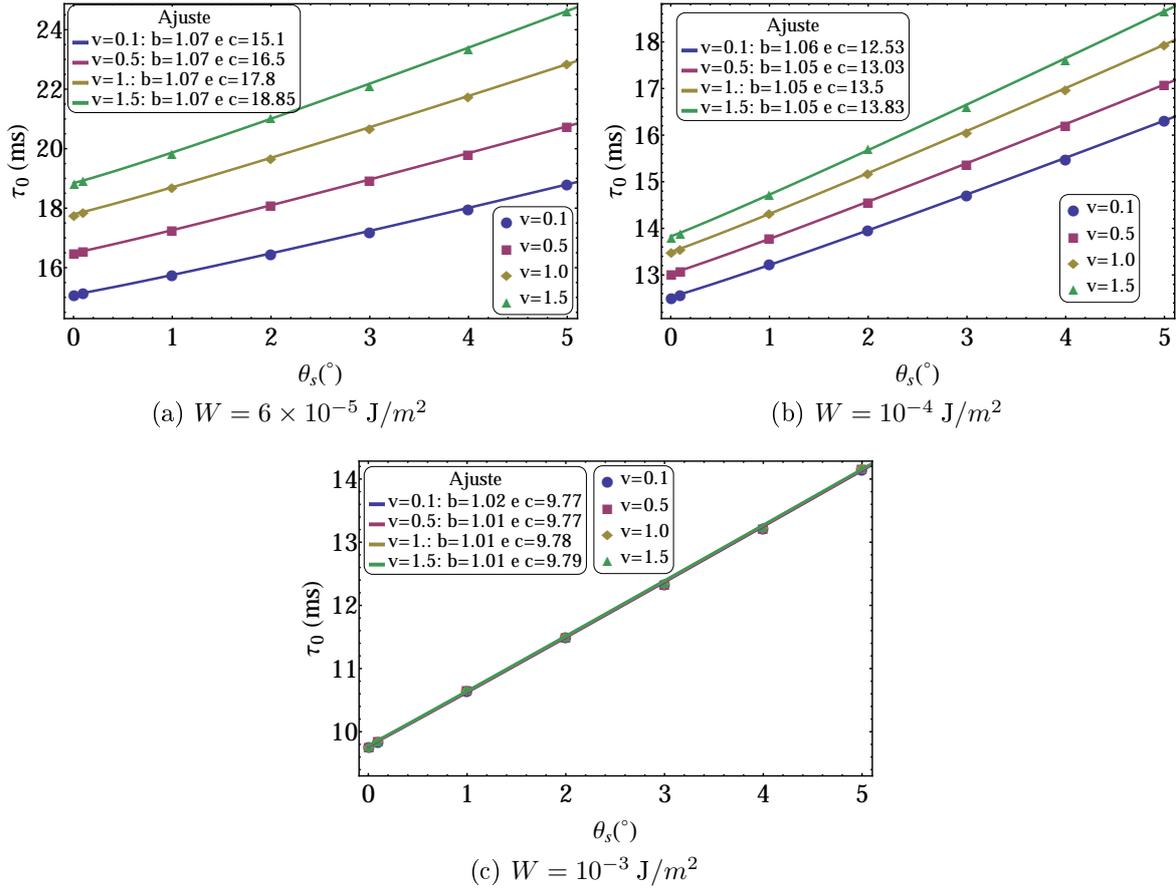


Figura 4.3: Tempos de relaxamento do diretor por *pretilt* e ajustes desses tempos pela função  $f(\theta_s) = a\theta_s^b + c$ . Os valores foram obtidos com os parâmetros  $V = 1.05V_{th}$  e  $d = 3\mu m$ .

Para ancoramentos fortes e espessuras maiores, os expoentes se aproximam mais do comportamento linear. Para  $d = 9 \mu m$  e  $W = 10^{-3} \text{ J/m}^2$ , obtivemos um comportamento praticamente linear. Em geral, os expoentes são quase invariantes em relação à viscosidade de superfície. Conforme o ancoramento e a espessura diminuem, o expoente cresce suavemente.

Podemos, ainda, notar que o *pretilt* provoca maiores variações nos tempos de relaxamento quando os ancoramentos são mais intensos e as espessuras da célula são maiores.

Na seção anterior, estudamos a dependência dos tempos de relaxação com viscosidade de superfície para  $\theta_s = 0.01^\circ$ . E agora investigaremos como as variações no ângulo de *pretilt* alteram esse comportamento.

Nos gráficos das figuras 4.3 e 4.4, é visível que, para ancoramentos fortes, os desvios relativos não são expressivos, independentemente do ângulo de *pretilt* e da espessura. Dessa forma, não há necessidade de analisar esse caso.

Quando o ancoramento é do tipo fraco, variações no *pretilt* causam alterações nos desvios relativos. Devido à escala dos gráficos ser muito grande, é difícil de avaliar quantitativamente esse efeito.

Para a análise quantitativa, utilizamos o conjunto de tabelas 4.4, em que se encontram os desvios relativos obtidos para diferentes valores de *pretilt*. Para apresentar os dados, escolhemos uma espessura pequena, pois o efeito é mais intenso nesses casos.

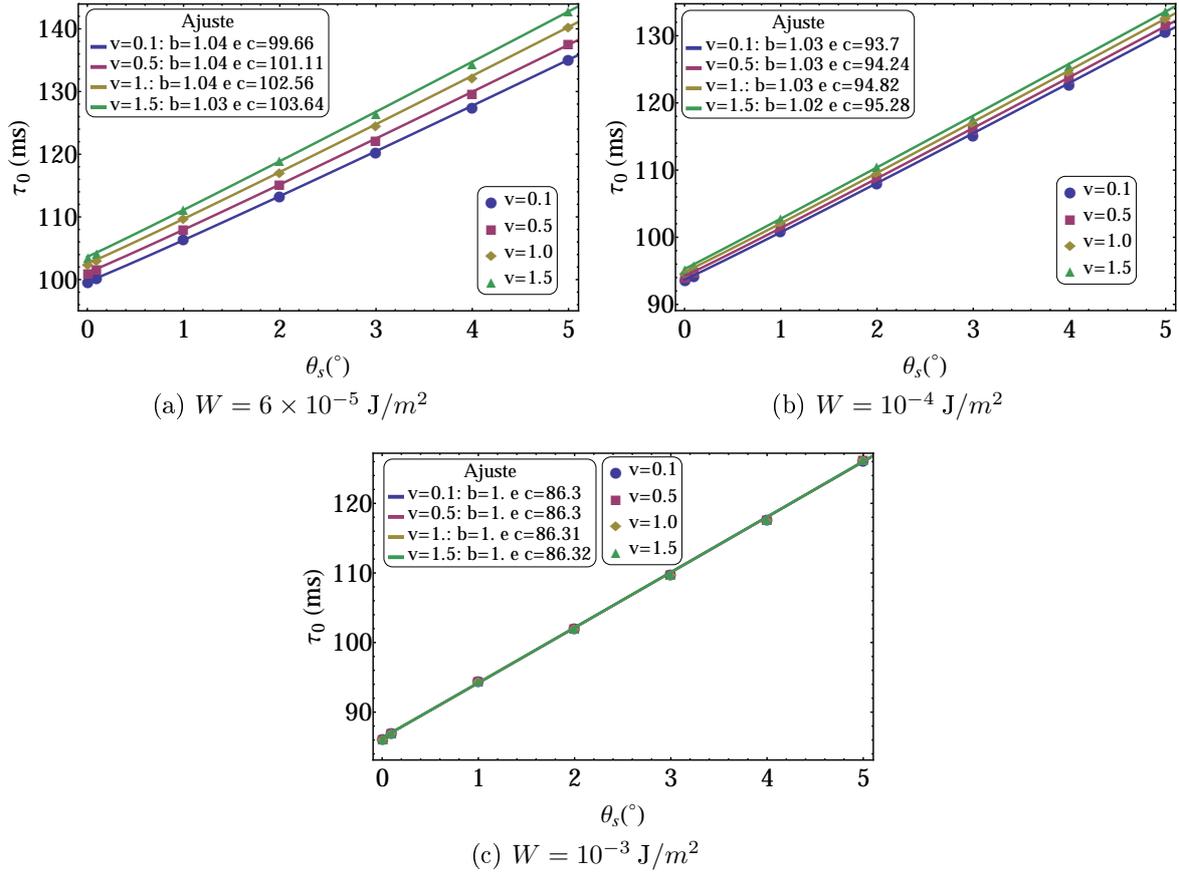


Figura 4.4: Tempos de relaxamento do diretor por *pretilt* e ajustes desses tempos pela função  $f(\theta_s) = a\theta_s^b + c$ . Os valores foram obtidos com os parâmetros  $V = 1.05V_{th}$  e  $d = 9\mu m$ .

	v=0.1	v=0.5	v=1.0	v=1.5
v=0.1	0%	9.5%	18.7%	25.9%
v=0.5	-8.7%	0%	8.3%	14.9%
v=1.0	-15.7%	-7.7%	0%	6%
v=1.5	-20.5%	-12.9%	-5.6%	0%

(a)  $\theta_s = 1^\circ$

	v=0.1	v=0.5	v=1.0	v=1.5
v=0.1	0%	10%	20.2%	28.6%
v=0.5	-9.1%	0%	9.2%	16.8%
v=1.0	-16.8%	-8.5%	0%	7%
v=1.5	-22.2%	-14.4%	-6.5%	0%

(b)  $\theta_s = 3^\circ$

	v=0.1	v=0.5	v=1.0	v=1.5
v=0.1	0%	10.3%	21.5%	31.1%
v=0.5	-9.4%	0%	10%	18.7%
v=1.0	-17.7%	-9.1%	0%	7.9%
v=1.5	-23.7%	-15.8%	-7.3%	0%

(c)  $\theta_s = 5^\circ$

Tabela 4.4: Tabelas contendo o desvio relativo dos tempos de relaxamento do diretor em relação à viscosidade de superfície. Os valores da tabela foram simulados utilizando os parâmetros  $d = 3 \mu m$ ,  $W = 6 \times 10^{-5} \text{ J/m}^2$  e  $V = 1.05 V_{th}$ .

Se compararmos os conjuntos de tabelas 4.4 e 4.2, podemos notar que as variações nos tempos de relaxamento foram expressivas.

### 4.1.3 Comportamento em relação à diferença de potencial

É esperado que os tempos de relaxamento do diretor sejam independentes da diferença de potencial. Contudo, esse comportamento é obtido admitindo que as deformações provocadas pelo campo elétrico sejam pequenas. Numericamente, não é necessário admitir essa condição. Desse modo, por meio das simulações, podemos analisar como esse parâmetro altera o comportamento do sistema.

Embora tenhamos mostrado no capítulo 3 que o cálculo de  $\tau_0$  para altas diferenças de potenciais possui erros expressivos, ainda é possível estimar os tempos de relaxamento com uma precisão aceitável para realizar essa análise.

Na figura 4.5, encontramos ajustados gráficos de tempo de relaxamento por diferença de potencial para diversos parâmetros. Em geral, a dependência dos tempos de relaxação em relação a esse parâmetro é relativamente forte. Podemos observar que as variações nos tempos de relaxamento são um pouco maiores para valores mais baixos de ancoramento e para espessuras menores.

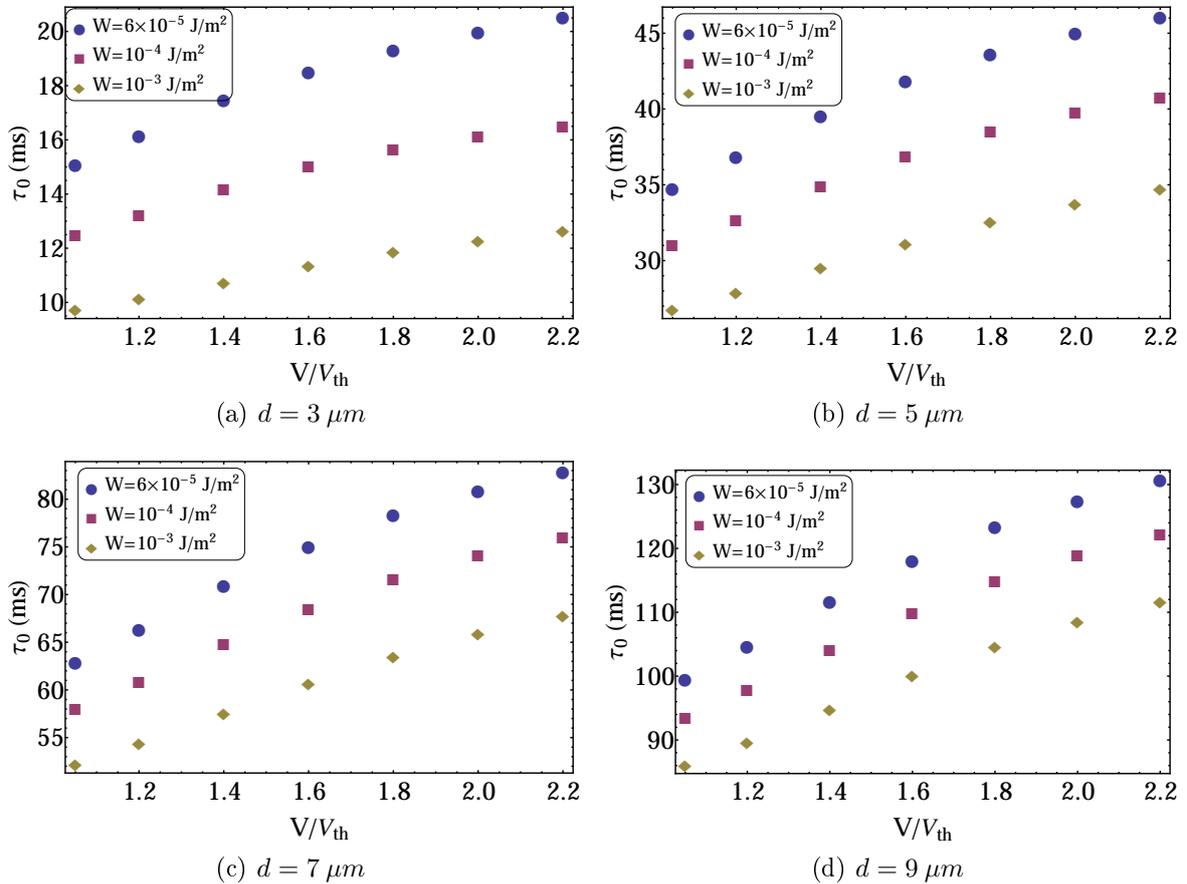


Figura 4.5: Tempos de relaxamento do diretor por diferença de potencial simulados com os parâmetros  $\theta_s = 0.01^\circ$  e  $v = 0.1$ .

Em relação à viscosidade de superfície, o aumento da diferença de potencial deixa o sistema mais sensível a variações nesse parâmetro. No conjunto de gráficos da figura 4.6, podemos ver claramente esse efeito. Notamos que ele ocorre muito mais intensamente em espessuras pequenas. Isso porque, para elas, as deformações sofridas pelo diretor ocorrem em regiões menores; quando a diferença de potencial é alta, as deformações ficam ainda

maiores e ocorrem no mesmo espaço reduzido. Assim sendo, o sistema fica mais susceptível a variações de alguns parâmetros, como a viscosidade de superfície.

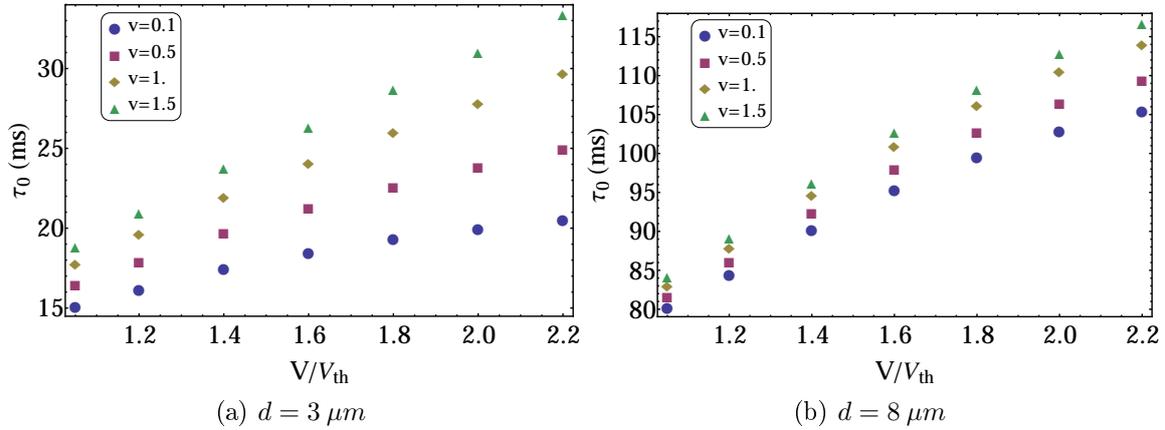


Figura 4.6: Gráficos de tempo de relaxamento do diretor por diferença de potencial para  $W = 6 \times 10^{-5} \text{J/m}^2$  e  $\theta_s = 0.01^\circ$ .

Para analisar quantitativamente o efeito da diferença de potencial, elaboramos duas tabelas de desvio relativo. Para observarmos a intensidade desse efeito, comparamos os conjuntos de tabelas 4.5 e 4.2. Notamos que o pequeno aumento na diferença de potencial quase dobrou o valor de grande parte dos desvios relativos.

Se compararmos ainda, os grupos de tabelas 4.5 e 4.4, podemos observar que, nos casos estudados, o efeito da diferença de potencial é mais determinante que o efeito do *pretilt*.

	v=0.1	v=0.5	v=1.0	v=1.5
v=0.1	0%	12.92%	25.88%	36.05%
v=0.5	-11.44%	0.	11.48%	20.48%
v=1.0	-20.56%	-10.3%	0.	8.08 %
v=1.5	-26.5%	-17%	-7.48%	0%

(a)  $d = 3\mu\text{m}$

	v=0.1	v=0.5	v=1.0	v=1.5
v=0.1	0%	1.98%	4.13%	5.45%
v=0.5	-1.94%	0%	2.1%	3.4%
v=1.0	-3.9%6	-2.06%	0%	1.27%
v=1.5	-5.17%	-3.29%	-1.26%	0%

(b)  $d = 9\mu\text{m}$

Tabela 4.5: Tabelas contendo o desvio relativo dos tempos de relaxamento do diretor em relação à viscosidade de superfície. Os valores da tabela foram simulados utilizando os parâmetros  $\theta_s = 0.01^\circ$ ,  $W = 6 \times 10^{-5} \text{J/m}^2$  e  $V = 1.4 V_{th}$ .

## 4.2 Tempos óticos

### 4.2.1 Comportamento em relação à espessura da célula

No caso dos tempos óticos, não possuímos uma equação explícita para o cálculo de seus valores. Dessa forma, avaliamos somente os resultados numéricos.

Iniciamos com a relação entre o tempo ótico e a espessura do *slab*. Na figura 4.7, podemos visualizar esse comportamento.

Podemos observar que, para ancoramentos fortes, o expoente do crescimento também fica muito próximo de 2 e diminui conforme o ancoramento é reduzido. O aumento da viscosidade de superfície também diminui consideravelmente o mesmo expoente.

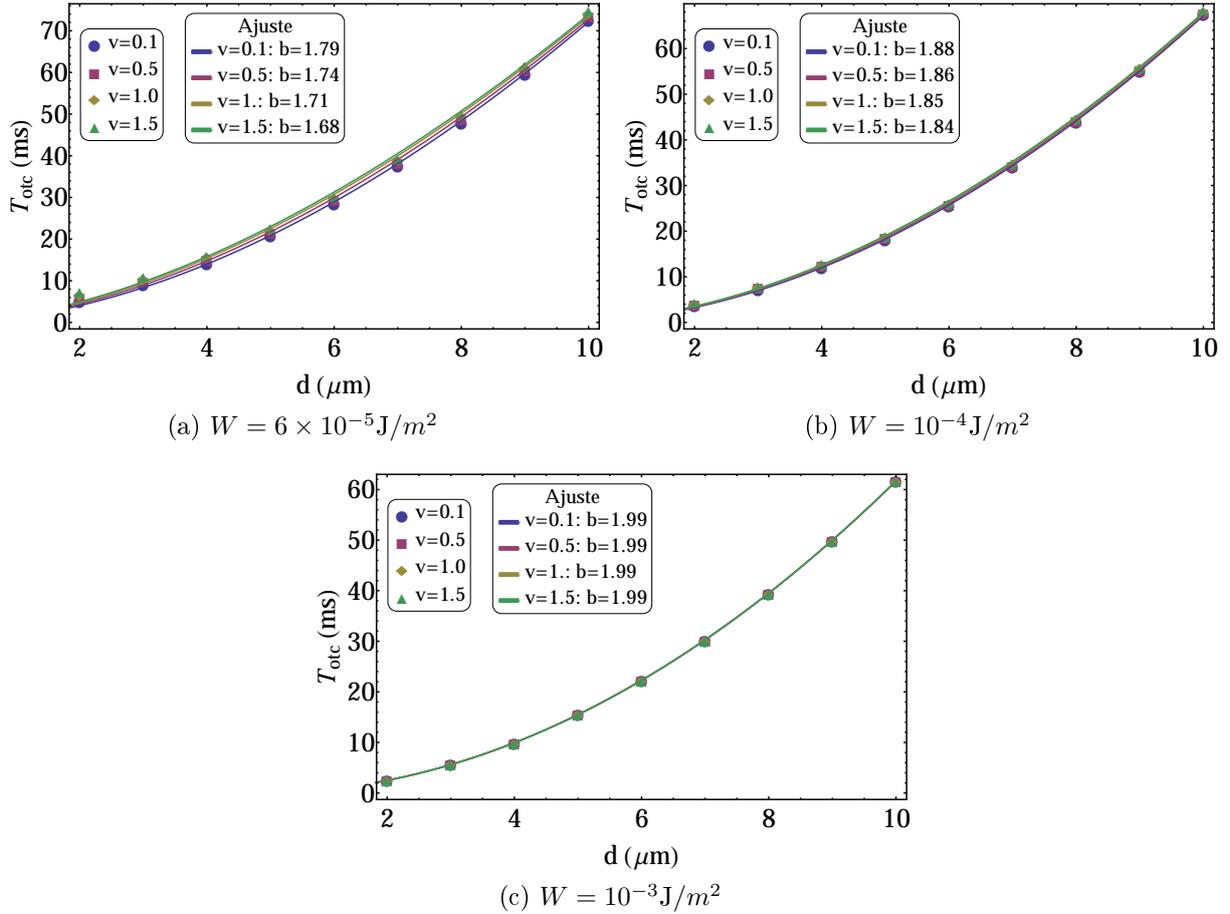


Figura 4.7: Tempos de relaxamento ótico por espessura e ajuste desses tempos pela curva  $f(d) = ad^b$ . Os valores foram obtidos com os parâmetros  $\theta_s = 0.01^\circ$  e  $V/V_{th} = 1.05$ .

Como já era esperado, os tempos de relaxamento óticos são menores para maiores valores de ancoramento. Em pequenas espessuras, a dependência dos tempos de relaxação em relação ao ancoramento é alta; e em grandes espessuras, a dependência continua sendo expressiva, mas menor.

Para altos valores de ancoramento, o sistema não apresenta variações significativas de tempo de relaxamento ótico em relação à viscosidade de superfície.

No caso de ancoramentos mais fracos, é visível que o sistema apresenta tempos óticos distintos para diferentes viscosidades de superfície. Devido à escala desses gráficos apresentar valores muito altos, não é possível analisar as variações em detalhes. Para tanto, separamos os dados de desvios relativos e absolutos dos tempos de resposta para algumas espessuras. Os desvios relativos podem ser vistos na tabela 4.6 e os absolutos na tabela 4.7.

Podemos verificar que o valor do desvio absoluto é praticamente constante em relação à espessura. Desse modo, a viscosidade de superfície é mais determinante para pequenas espessuras quando os tempos de relaxamento óticos são comparáveis com os tempos do desvio absoluto. Isso pode ser visto com mais clareza nos desvios relativos.

Quando a espessura de  $d = 2 \mu\text{m}$ , a diferença de tempo entre  $v = 0.1$  e  $v = 1.5$  atinge quase 45% do tempo obtido para o primeiro valor. Embora menores, as demais variações continuam na ordem do tempo de relaxamento.

Conforme a espessura aumenta, o desvio relativo diminui consideravelmente. Obser-

	v=0.1	v=0.5	v=1.0	v=1.5		v=0.1	v=0.5	v=1.0	v=1.5
v=0.1	0%	17.28%	32.91%	44.78%	v=0.1	0%	3.91%	7.1%	9.12%
v=0.5	-14.73%	0%	13.32%	23.44%	v=0.5	-3.76%	0%	3.07%	5.02%
v=1.0	-24.76%	-11.75%	0%	8.92%	v=1.0	-6.63%	-2.98%	0%	1.89%
v=1.5	-30.92%	-18.99%	-8.19%	0%	v=1.5	-8.36%	-4.78%	-1.86%	0%

(a)  $d = 2 \mu m$ (b)  $d = 5 \mu m$ 

	v=0.1	v=0.5	v=1.0	v=1.5		v=0.1	v=0.5	v=1.0	v=1.5
v=0.1	0%	2.21%	4.11%	5.35%	v=0.1	0%	1.19%	2.3%	3.06%
v=0.5	-2.17%	0%	1.86%	3.07%	v=0.5	-1.18%	0%	1.1%	1.85%
v=1.0	-3.95%	-1.82%	0%	1.19%	v=1.0	-2.25%	-1.08%	0%	0.75%
v=1.5	-5.08%	-2.98%	-1.17%	0%	v=1.5	-2.97%	-1.82%	-0.74%	0%

(c)  $d = 7 \mu m$ (d)  $d = 10 \mu m$ 

Tabela 4.6: Desvios relativos dos valores de tempo de relaxamento ótico em porcentagem, simulados com os parâmetros  $V/V_{th} = 1.05$ ,  $pretilt = 0.01$  e  $W = 6 \times 10^{-5} J/m^2$ .

	v=0.1	v=0.5	v=1.0	v=1.5		v=0.1	v=0.5	v=1.0	v=1.5
v=0.1	0.	0.88	1.68	2.29	v=0.1	0.	0.81	1.47	1.9
v=0.5	-0.88	0.	0.80	1.40	v=0.5	-0.81	0.	0.66	1.08
v=1.0	-1.68	-0.80	0.	0.60	v=1.0	-1.47	-0.66	0.	0.42
v=1.5	-2.29	-1.40	-0.60	0.	v=1.5	-1.9	-1.08	-0.42	0.

(a)  $d = 2 \mu m$ (b)  $d = 5 \mu m$ 

	v=0.1	v=0.5	v=1.0	v=1.5		v=0.1	v=0.5	v=1.0	v=1.5
v=0.1	0.	0.83	1.55	2.01	v=0.1	0.	0.86	1.67	2.23
v=0.5	-0.83	0.	0.72	1.18	v=0.5	-0.86	0.	0.81	1.36
v=1.0	-1.55	-0.72	0.	0.46	v=1.0	-1.67	-0.81	0.	0.56
v=1.5	-2.01	-1.18	-0.46	0.	v=1.5	-2.23	-1.36	-0.56	0.

(c)  $d = 7 \mu m$ (d)  $d = 10 \mu m$ 

Tabela 4.7: Desvios absolutos dos valores de tempo de relaxamento ótico em  $ms$  simulados com os parâmetros  $V = 1.05 V_{th}$ ,  $\theta_s = 0.01^\circ$  e  $W = 6 \times 10^{-5} J/m^2$ .

vamos que, para a espessura de  $5 \mu m$ , as variações em relação à viscosidade já diminuem, mas continuam sendo expressivas. Por fim, aumentando a espessura para  $d = 10 \mu m$  e mantendo os demais valores constantes, obtemos 3.06% de desvio relativo para a maior variação.

A explicação física desse comportamento é a mesma da seção anterior. Em espessuras menores, os efeitos de superfície exercem mais influência sobre o volume do sistema. Assim, para espessuras ainda menores que as apresentadas, é esperado que o efeito seja ainda mais determinante.

Note que o tempo de relaxamento ótico é o que se observa em laboratório e está diretamente relacionado a *displays*. Portanto, a viscosidade de superfície tem papel fundamental, como demonstrado, em aplicações.

## 4.2.2 Comportamento em relação ao *pretilt*

Em relação ao *pretilt*, para pequenos valores, os tempos óticos apresentam crescimento aproximadamente linear. O expoente do crescimento aumenta suavemente com a intensidade do ancoramento e com a espessura. Para ancoramentos fortes e espessuras pequenas, ele fica em torno de 0.95 e, para ancoramentos pequenos e grandes espessuras, ele fica próximo a 1.15. Esse comportamento pode ser visualizado nas figuras 4.8 e 4.9.

As alterações no valor do *pretilt* podem causar desde pequenas perturbações até variações comparáveis aos tempos óticos, dependendo dos demais parâmetros envolvidos.

Em baixos valores de diferenças de potencial, o *pretilt* possui um efeito muito considerável sobre o sistema. Para pequenas espessuras, o sistema apresenta grandes variações para ancoramentos fortes. Conforme o valor do ancoramento diminui, as variações nos tempos causadas pelo *pretilt* continuam consideráveis, mas menores. Esses resultados podem ser visualizados na figura 4.8.

Aumentando a espessura, a dependência em relação ao *pretilt* fica mais acentuada para ambos os tipos de ancoramentos. Esse comportamento pode ser visualizado na figura 4.9.

Altas diferenças de potencial atenuam consideravelmente o efeito do *pretilt* sobre o sistema. Nesse regime, as variações no *pretilt* continuam alterando significativamente os valores dos tempos de relaxamento ótico, mas essas variações são menos efetivas quando comparadas com os mesmos casos para baixas voltagens, tanto em valores absolutos quanto em relativos.

Para pequenas espessuras, os resultados podem ser vistos na figura 4.10; e, para grandes espessuras, na figura 4.11.

Nos desvios relativos, o efeito do *pretilt* é pouco expressivo. Nos gráficos, podemos ver que, para ancoramentos fortes, não há variações consideráveis.

Para ancoramento fraco, o desvio relativo é apreciável, porém, este varia muito pouco em relação ao *pretilt*, por exemplo, o desvio relativo máximo na tabela 4.6 é de 44.78%. Mantendo os demais parâmetros constantes e aumentando  $\theta_s$  para  $3^\circ$ , a maior diferença relativa atinge 48.75%. Para mais detalhes, ver tabela 4.8.

	v=0.1	v=0.5	v=1.0	v=1.5		v=0.1	v=0.5	v=1.0	v=1.5
v=0.1%	0%	17.8%	35.0%	48.7%	v=0.1	0%	4.5%	8.6%	11.5%
v=0.5%	-15.1%	0%	14.6%	26.2%	v=0.5	-4.3%	0%	4.0%	6.7%
v=1.0%	-26.0%	-12.7%	0%	10.2%	v=1.0	-7.9%	-3.8%	0%	2.7%
v=1.5%	-32.8%	-20.8%	-9.2%	0%	v=1.5	-10.3%	-6.3%	-2.6%	0%

(a)  $d = 2 \mu m$  (b)  $d = 5 \mu m$

	v=0.1	v=0.5	v=1.0	v=1.5		v=0.1	v=0.5	v=1.0	v=1.5
v=0.1	0%	2.6%	5.2%	7.0%	v=0.1	0%	1.4%	2.9%	4.1%
v=0.5	-2.5%	0%	2.5%	4.3%	v=0.5	-1.4%	0%	1.5%	2.7%
v=1.0	-4.9%	-2.4%	0%	1.8%	v=1.0	-2.8%	-1.5%	0%	1.1%
v=1.5	-6.5%	-4.1%	-1.7%	0%	v=1.5	-3.9%	-2.6%	-1.1%	0%

(c)  $d = 7 \mu m$  (d)  $d = 10 \mu m$

Tabela 4.8: Desvios relativos dos valores de tempo de relaxamento ótico em porcentagem simulados com os parâmetros  $V/V_{th} = 1.05$ ,  $pretilt = 3^\circ$  e  $W = 6 \times 10^{-5} J/m^2$ .

As variações absolutas são mais sensíveis às variações de  $\theta_s$ . Mantendo os parâmetros da tabela 4.6 constantes e aumentando  $\theta_s$  para  $2^\circ$  e  $5^\circ$ , as variações absolutas máximas

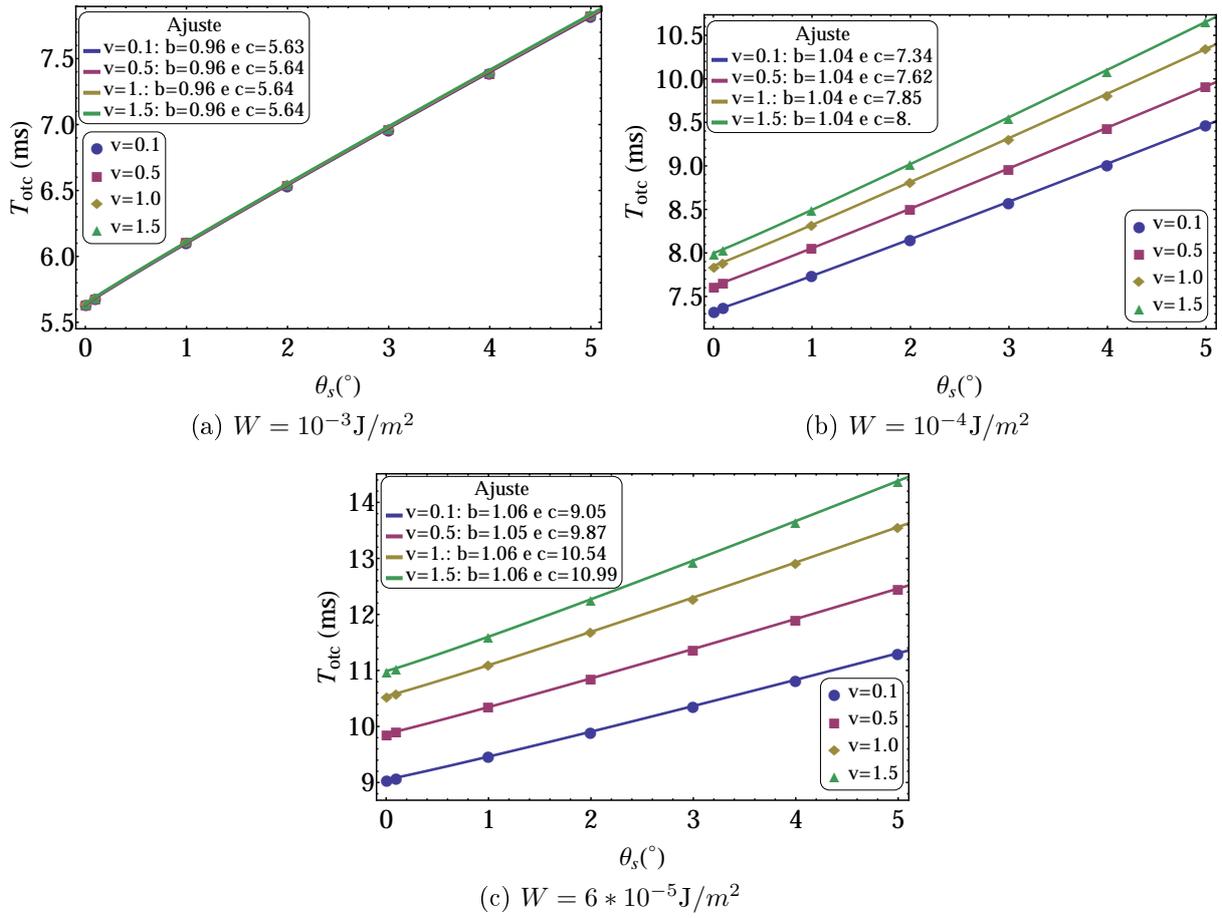


Figura 4.8: Tempos óticos por *pretilt* e ajuste da curva  $f(\theta_s) = a\theta_s^b + c$ . Os valores foram obtidos com os parâmetros  $d = 3 \mu\text{m}$  e  $V/V_{th} = 1.05$

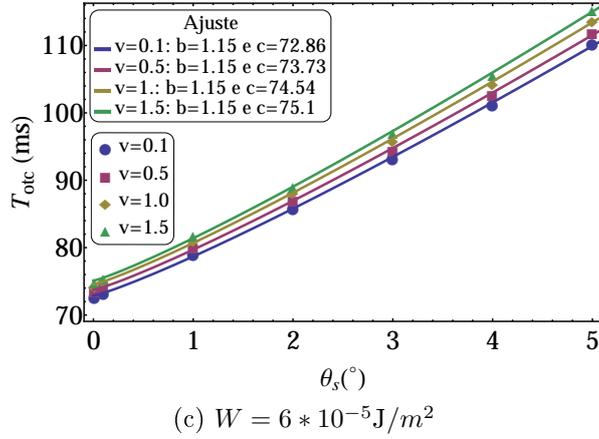
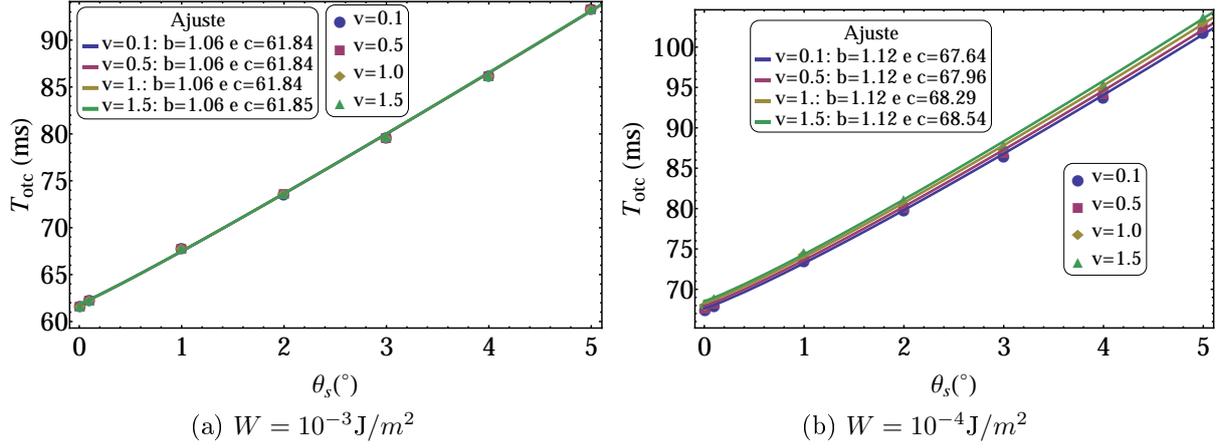


Figura 4.9: Tempos óticos por *pretilt* e ajuste da curva  $f(\theta_s) = a\theta_s^b$ . Os valores foram obtidos com os parâmetros  $d = 10 \mu\text{m}$  e  $V/V_{th} = 1.05$ .

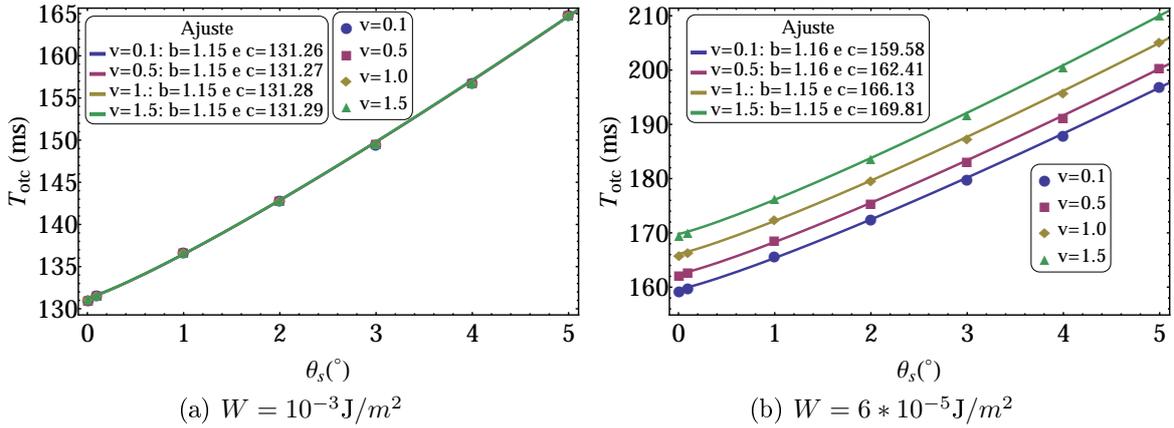


Figura 4.10: Tempos óticos por *pretilt* e ajuste da curva  $f(\theta_s) = a\theta_s^b$ . Os valores foram obtidos com os parâmetros  $V/V_{th} = 1.8$  e  $d = 10 \mu\text{m}$ .

atingem  $2.6 \text{ ms}$  e  $4.14 \text{ ms}$ , respectivamente.

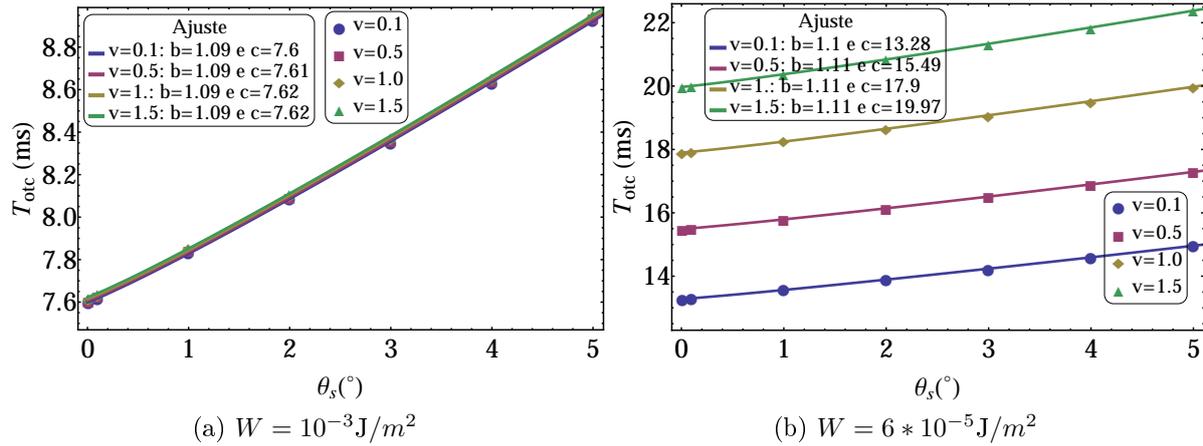


Figura 4.11: Tempos óticos por *pretilt* e ajuste da curva  $f(\theta_s) = a\theta_s^b$ . Os valores foram obtidos com os parâmetros  $V/V_{th} = 1.8$  e  $d = 3 \mu m$ .

### 4.2.3 Comportamento em relação à diferença de potencial

Em geral, o efeito da diferença de potencial é alto. Para ancoramentos fracos, as variações nos tempos óticos são muito expressivas, sendo que, para espessuras maiores, as variações são mais pronunciadas. Os resultados são apresentados na figura 4.12.

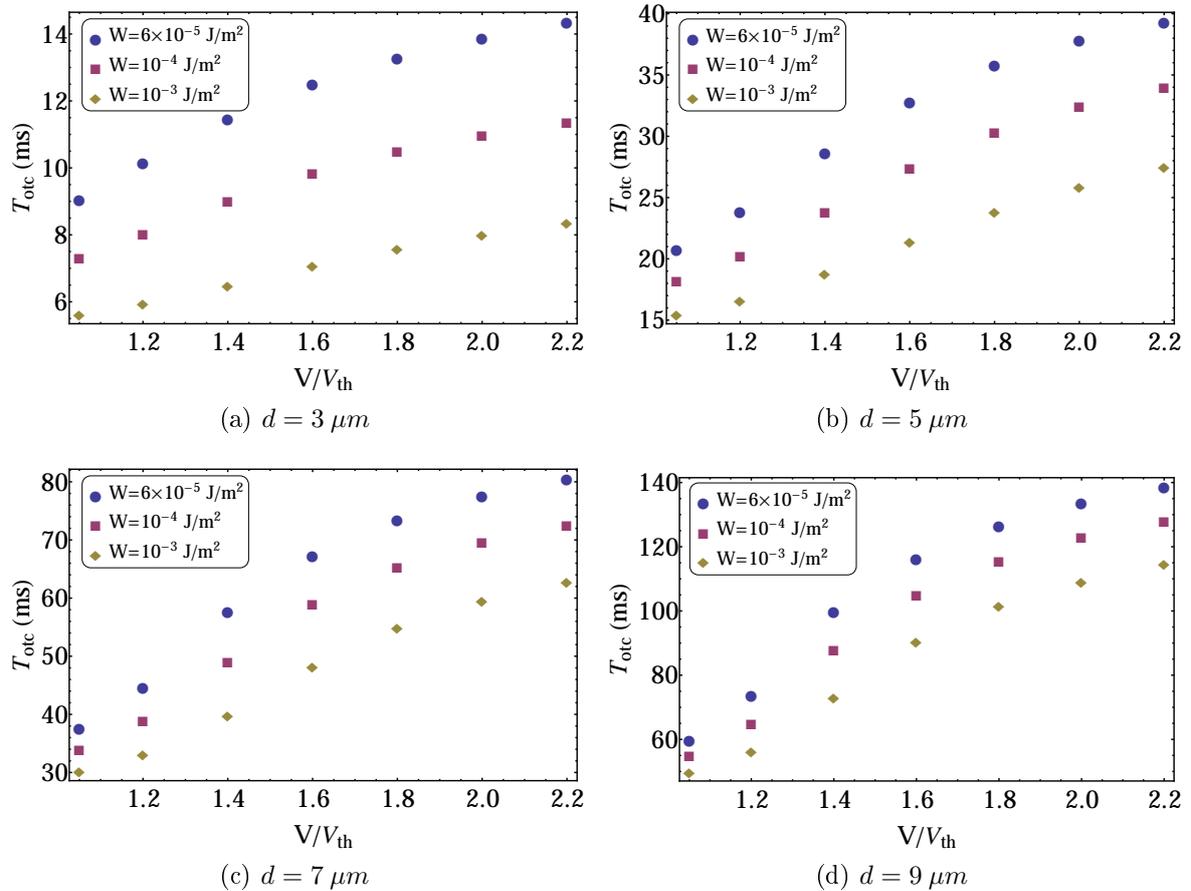


Figura 4.12: Tempos óticos por  $V/V_{th}$  simulados com os parâmetros  $v = 0.1$  e  $\theta_s = 0.01^\circ$ .

Ainda observando a figura 4.12, constatamos que, para ancoramentos fortes, o sistema apresenta acentuada dependência em relação à diferença de potencial para grandes espessuras. Para pequenas espessuras, a dependência dos tempos de relaxamento são consideráveis, mas menores.

Para baixos ancoramentos e pequenas espessuras, variações na viscosidade de superfície causam modificações substanciais no comportamento do sistema. Na figura 4.13, podemos ver que, para  $V/V_{th} = 2.2$ , a variação da viscosidade faz com que o tempo de relaxamento ótico aumente mais do que duas vezes. Para grandes espessuras, o efeito ainda é expressivo, mas muito menos pronunciado que para o caso de pequenas espessuras.

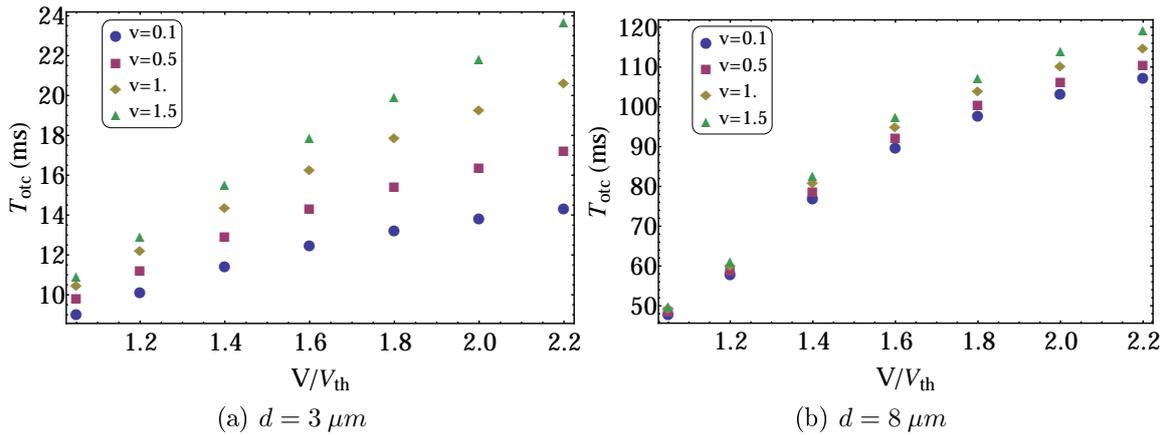


Figura 4.13: Gráficos de tempo de relaxamento ótico por diferença de potencial simulados com os parâmetros  $W = 6 \times 10^{-5} \text{J/m}^2$  e  $\theta_s = 0.01^\circ$ .

Mudanças nos parâmetros de *pretilt* não causam mudanças expressivas no comportamento do sistema em relação à diferença de potencial. Esse comportamento pode ser visualizado na figura 4.14.

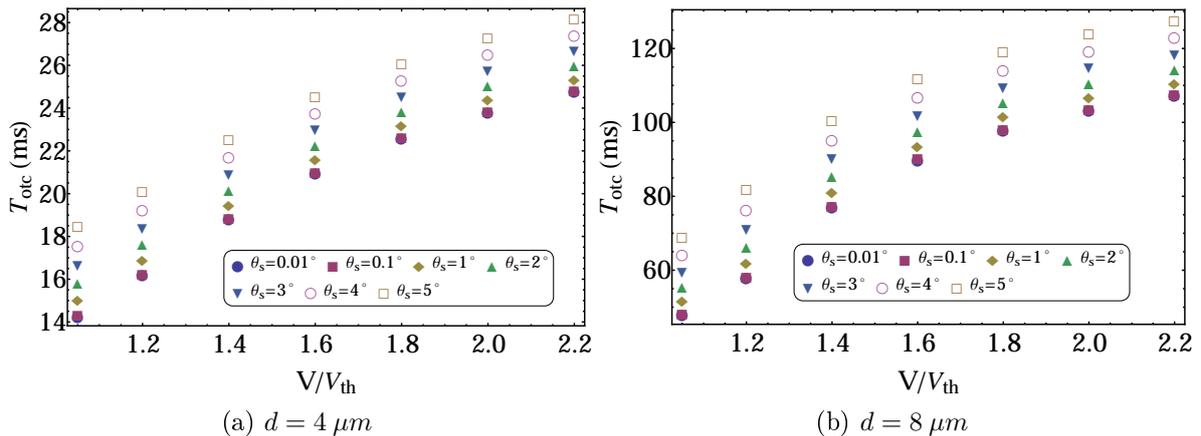


Figura 4.14: Gráficos de tempo de relaxamento ótico por diferença de potencial simulados com os parâmetros  $W = 6 \times 10^{-5} \text{J/m}^2$  e  $v = 0.1$ .

Para pequenas espessuras, o desvio relativo apresenta grande sensibilidade à diferença de potencial. Na tabela 4.6, obtemos os desvios relativos para  $V/V_{th} = 1.05$ . Mantendo os mesmos parâmetros e aumentando a diferença de potencial, os desvios relativos sobem consideravelmente, como podemos visualizar na tabela 4.9.

Conforme a espessura aumenta, o desvio relativo diminui consideravelmente. Se utilizarmos os mesmos parâmetros da tabela 4.9, mas aumentarmos a espessura para  $d = 8\mu m$ , o maior desvio relativo será de 6.15%.

	v=0.1	v=0.5	v=1.0	v=1.5
v=0.1	0%	24.6%	50.9%	74.1%
v=0.5	-19.7%	0%	21.1%	39.7%
v=1.0	-33.7%	-17.4%	0%	15.4%
v=1.5	-42.6%	-28.4%	-13.3%	0%

(a)  $d = 2\mu m$

	v=0.1	v=0.5	v=1.0	v=1.5
v=0.1	0%	5.5%	11.2%	15.6%
v=0.5	-5.2%	0%	5.4%	9.5%
v=1.0	-10.1%	-5.1%	0%	3.9%
v=1.5	-13.5%	-8.7%	-3.8%	0%

(b)  $d = 5\mu m$

	v=0.1	v=0.5	v=1.0	v=1.5
v=0.1	0%	3%	6.5%	9.2%
v=0.5	-3%	0%	3.3%	6%
v=1.0	-6.1%	-3.2%	0%	2.6%
v=1.5	-8.4%	-5.7%	-2.5%	0%

(c)  $d = 7\mu m$

	v=0.1	v=0.5	v=1.0	v=1.5
v=0.1	0%	1.9%	4.2%	6.1%
v=0.5	-1.9%	0%	2.2%	4.1%
v=1.0	-4%	-2.2%	0%	1.9%
v=1.5	-5.8%	-4%	-1.8%	0%

(d)  $d = 10\mu m$

Tabela 4.9: Desvios relativos em porcentagem obtidos para os parâmetros  $W = 6 \times 10^{-5} J/m^2$ ,  $\theta_s = 2^\circ$  e  $V/V_{vc} = 1.4$ .

## 4.3 Tempos de relaxação de fase

### 4.3.1 Comportamento em relação à espessura e ao ancoramento

Novamente, não possuímos uma equação que permita o cálculo do tempo de relaxamento de fase ( $t_p$ ) explicitamente. Dessa forma, analisamos somente os resultados numéricos nesta seção.

Podemos ver, na figura 4.15, os gráficos de tempo de relaxamento de fase por tempo para diferentes viscosidades e ancoramentos. Para estudar a lei de potência da evolução dos tempos, além dos valores numéricos, também será plotado o ajuste dos pontos pela função  $f(d) = ad^b$ .

Assim como já era esperado, o sistema apresenta uma forte dependência da espessura. Para ancoramentos fortes, os tempos de relaxamento evoluem com o quadrado da espessura, independentemente dos valores de viscosidade de superfície.

Conforme o ancoramento é reduzido, o expoente do ajuste também diminui. Nesse regime, o aumento da viscosidade de superfície acarreta a redução do expoente. Se compararmos esses gráficos com os do tempo de relaxamento do diretor, podemos constatar que o comportamento desses dois sistemas nesses regimes são muito parecidos.

Em relação à viscosidade de superfície, assim como nos casos anteriores, temos dois comportamentos característicos: quando o ancoramento é alto, a variação desse parâmetro praticamente não influencia o comportamento do sistema; já quando o ancoramento é fraco, as variações da viscosidade de superfície podem causar grandes variações nos tempos de relaxamento de fase, especialmente quando a espessura é pequena.

O comportamento quantitativo do sistema em relação à viscosidade de superfície pode ser visualizado no conjunto de tabelas 4.10.

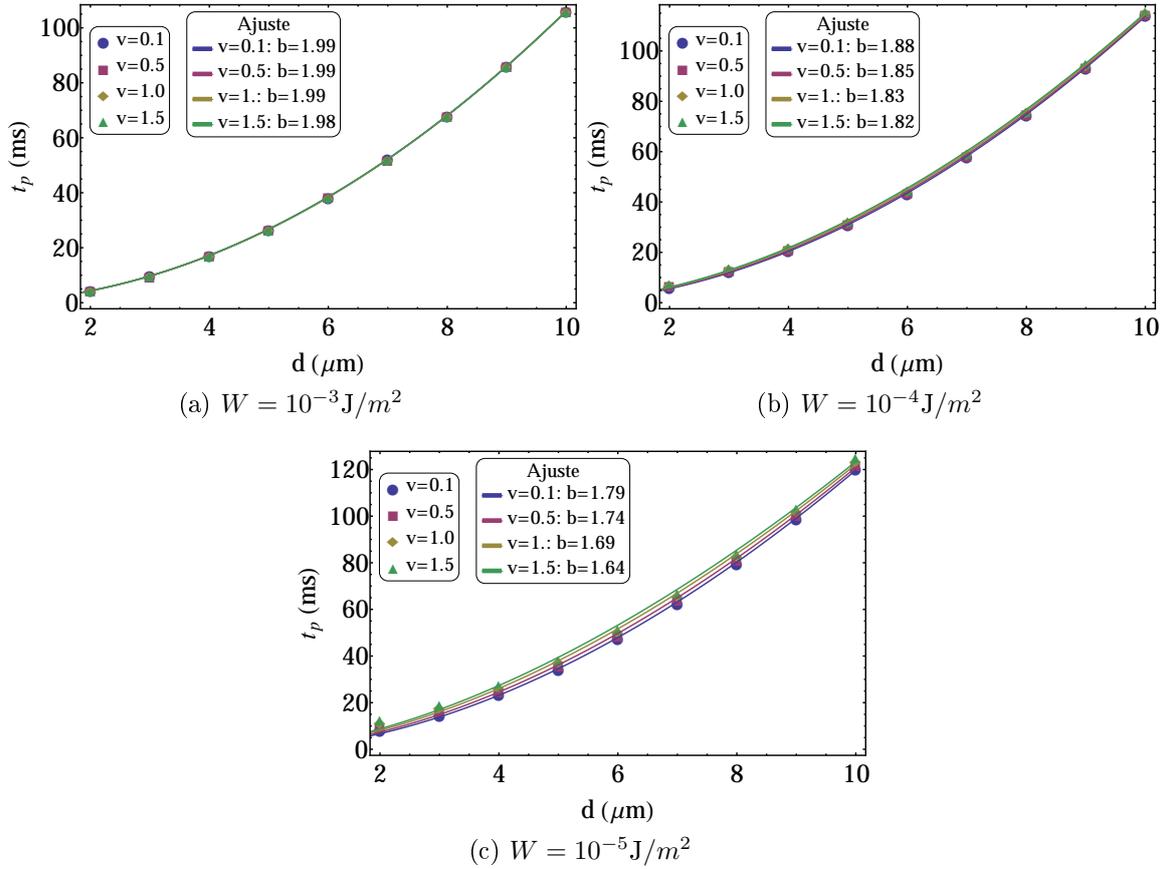


Figura 4.15: Gráficos dos tempos de relaxação da fase por espessura e do ajuste da curva  $f(d) = ad^b$  simulados com os parâmetros  $V/V_{th} = 1.05$  e  $\theta_s = 0.01^\circ$ .

	v=0.1	v=0.5	v=1.0	v=1.5		v=0.1	v=0.5	v=1.0	v=1.5
v=0.1	0%	18%	39.6%	59.3%	v=0.1	0%	4.4%	9%	12.4%
v=0.5	-15.3%	0%	18.3%	35%	v=0.5	-4.2%	0%	4.4%	7.7%
v=1.0	-28.4%	-15.4%	0%	14.1%	v=1.0	-8.2%	-4.2%	0%	3.2%
v=1.5	-37.2%	-25.9%	-12.4%	0%	v=1.5	-11%	-7.2%	-3.1%	0%

(a)  $d = 2 \mu\text{m}$

(b)  $d = 5 \mu\text{m}$

	v=0.1	v=0.5	v=1.0	v=1.5		v=0.1	v=0.5	v=1.0	v=1.5
v=0.1	0%	2.4%	5.1%	7.2%	v=0.1	0%	1.3%	2.7%	3.9%
v=0.5	-2.3%	0%	2.6%	4.7%	v=0.5	-1.2%	0%	1.4%	2.6%
v=1.0	-4.9%	-2.6%	0%	2%	v=1.0	-2.6%	-1.4%	0%	1.2%
v=1.5	-6.7%	-4.5%	-1.9%	0%	v=1.5	-3.8%	-2.6%	-1.2%	0%

(c)  $d = 7 \mu\text{m}$

(d)  $d = 10 \mu\text{m}$

Tabela 4.10: Desvio relativo dos valores de tempo de relaxamento óptico em porcentagem simulados com os parâmetros  $V/V_{th} = 1.05$ , pre-tilt = 0.01 e  $W = 6 \times 10^{-5} \text{J/m}^2$ .

Para espessura  $d = 2 \mu m$ , o sistema chega a apresentar uma variação de 59% do valor do tempo de relaxamento quando a viscosidade varia de  $v = 0.1$  para  $v = 1.5$ . Dos tempos estudados, esse é o maior valor obtido. Para tempo de relaxamento ótico, foi obtido o desvio de 48.7% (que pode ser verificado na tabela 4.6) e, para tempo de relaxamento do diretor, foi obtido o valor de 50.4% de desvio relativo.

Assim como os demais, o desvio relativo diminui rapidamente conforme a espessura diminui, contudo, os desvios ainda são expressivos.

### 4.3.2 Comportamento em relação ao *pretilt*

Em relação ao *pretilt*, os tempos de relaxamento de fase crescem de forma aproximadamente linear. Nesse caso, variações nos parâmetros de viscosidade de superfície e de espessura praticamente não alteram o valor do expoente do crescimento. Esses resultados podem ser visualizados nas curvas das figuras 4.16 e 4.17.

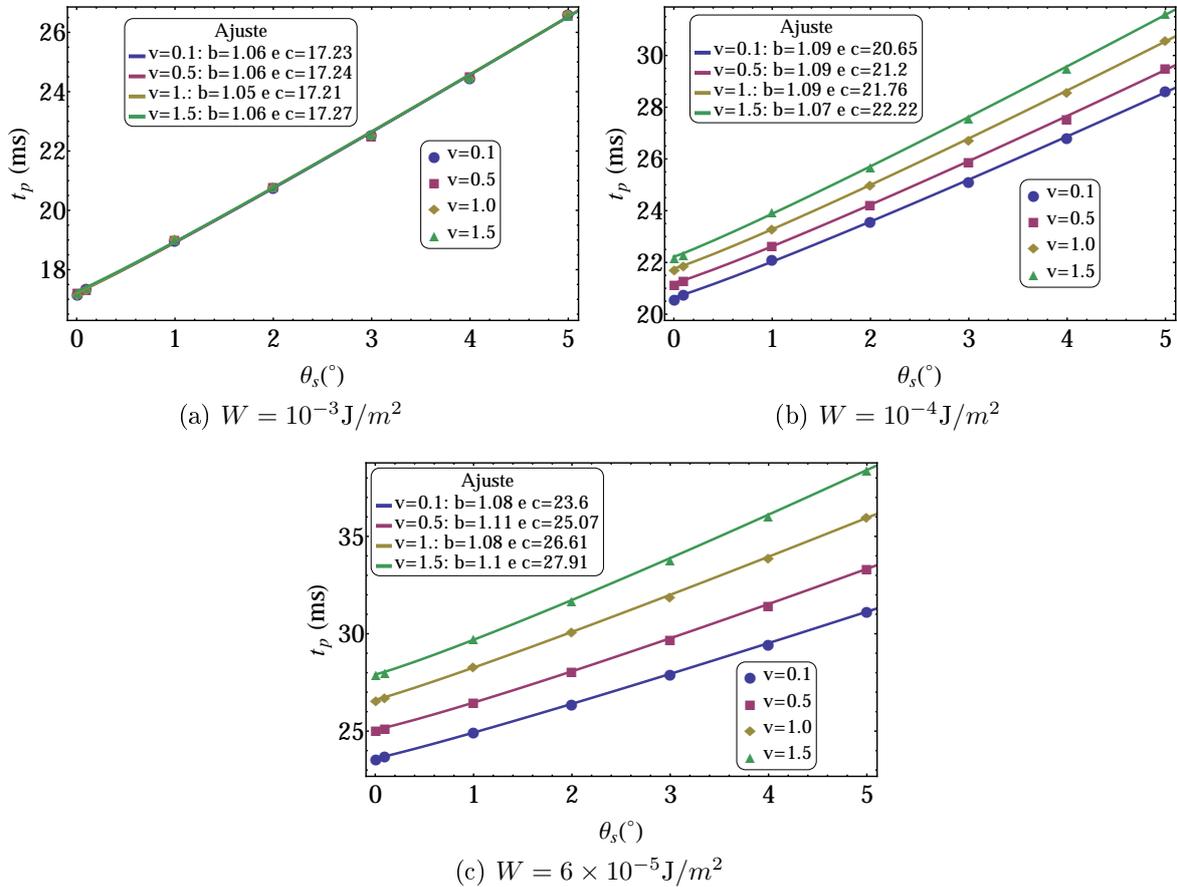


Figura 4.16: Tempos de relaxação de fase por *pretilt* e ajuste da curva  $f(\theta_s) = a\theta_s^b$  para  $d = 4 \mu m$ ,  $V/V_{th} = 1.05$

Podemos ver que, para a espessura  $d = 3 \mu m$ , os expoentes do melhor ajuste da curva  $f(d) = ad^b + c$  ficam todos em torno de 1.05–1.11. Aumentando a espessura para  $d = 9 \mu m$ , os expoentes reduzem apenas ligeiramente, ficando entre o intervalo 1.05 – 1.08.

As variações nos tempos de relaxamento são maiores em relação ao ângulo de *pretilt* para ancoramentos mais fortes. Comparado com os tempos de relaxação do diretor e de relaxação ótica, a mudança de comportamento provocada pela variação no ancoramento é mais brusca que para os casos anteriores.

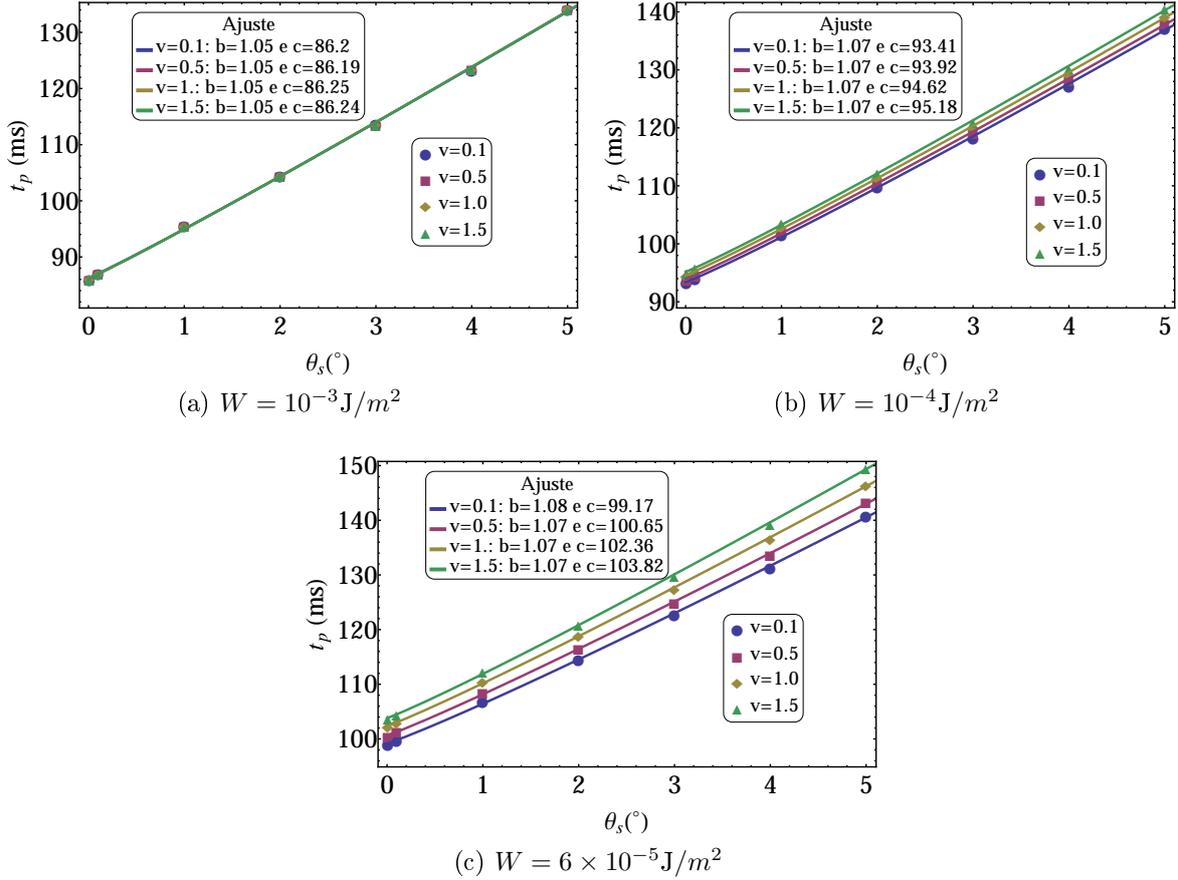


Figura 4.17: Tempos de relaxação de fase por *pretilt* e ajuste da curva  $f(\theta_s) = a\theta_s^b$  para  $d = 9 \mu\text{m}$ ,  $V/V_{th} = 1.05$ .

Para espessuras maiores, variações no *pretilt* causam respostas maiores nos tempos de relaxamento. Estas, por sua vez, são mais suaves, principalmente para ancoramentos fortes, em que a resposta é quase imperceptível.

Podemos ainda, observar que, para ancoramentos fortes, não existem variações expressivas nos tempos de resposta para variações na viscosidade de superfície. Para ancoramentos fracos, variações na viscosidade de superfície podem causar variações da ordem do tempos de relaxamento da fase. Os resultados quantitativos mais detalhados se encontram disponíveis no conjunto de tabelas 4.11.

Observe novamente que os desvios relativos são maiores para esse tempo de relaxamento que os demais. Para espessuras pequenas, o efeito é mais expressivo, mas para espessuras maiores, ele ainda é considerável.

Por fim, conforme a diferença de potencial aumenta, a dependência dos tempos de relaxamento de fase em relação ao *pretilt* diminui consideravelmente. Apesar das diferenças nos tempos de repostas ainda serem expressivas, elas são muito menores quando comparadas com os casos nos quais a diferença de potencial é mais baixa. Esse comportamento pode ser visto nas figuras 4.18 e 4.19.

	v=0.1	v=0.5	v=1.0	v=1.5
v=0.1	0.0%	18.5%	41.0%	61.5%
v=0.5	-15.6%	0.0%	19.0%	36.3%
v=1.0	-29.1%	-16.0%	0.0%	14.5%
v=1.5	-38.1%	-26.6%	-12.7%	0.0%

(a)  $d = 2 \mu\text{m}$

	v=0.1	v=0.5	v=1.0	v=1.5
v=0.1	0.0%	4.3%	9.2%	13.4%
v=0.5	-4.1%	0.0%	4.7%	8.7%
v=1.0	-8.4%	-4.5%	0.0%	3.8%
v=1.5	-11.8%	-8.0%	-3.7%	0.0%

(b)  $d = 5 \mu\text{m}$

	v=0.1	v=0.5	v=1.0	v=1.5
v=0.1	0.0%	2.5%	5.4%	7.7%
v=0.5	-2.4%	0.0%	2.8%	5.1%
v=1.0	-5.1%	-2.7%	0.0%	2.2%
v=1.5	-7.1%	-4.8%	-2.2%	0.0%

(c)  $d = 7 \mu\text{m}$

	v=0.1	v=0.5	v=1.0	v=1.5
v=0.1	0.0%	1.3%	2.9%	4.3%
v=0.5	-1.3%	0.0%	1.5%	2.9%
v=1.0	-2.8%	-1.5%	0.0%	1.3%
v=1.5	-4.1%	-2.8%	-1.3%	0.0%

(d)  $d = 10 \mu\text{m}$

Tabela 4.11: Desvio relativo dos valores de tempo de relaxação de fase em %, simulados com os parâmetros  $V/V_{th} = 1.05$ ,  $\theta_s = 3^\circ$  e  $W = 6 \times 10^{-5} \text{J/m}^2$ .

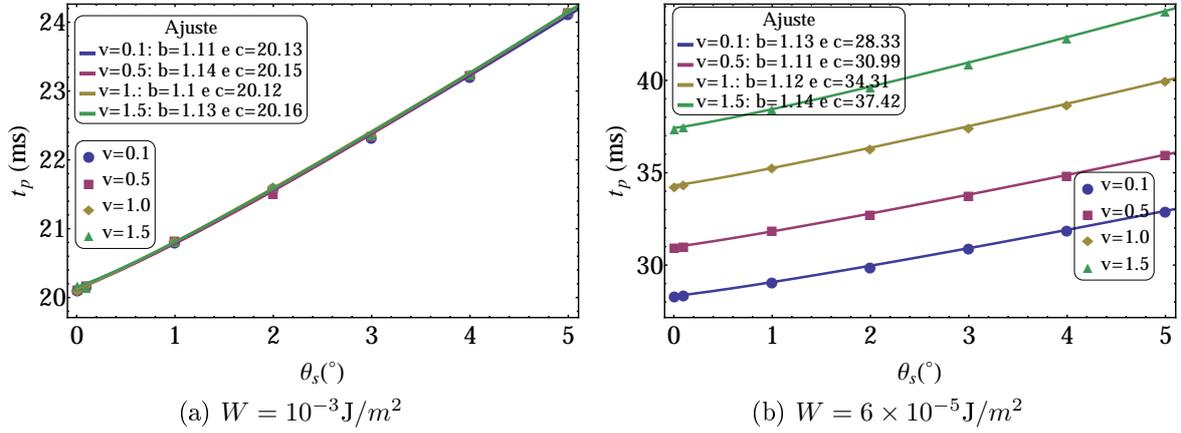


Figura 4.18: Tempos de relaxação de fase por *pretilt* e ajuste da curva  $f(\theta_s) = a\theta_s^b$  para  $d = 4 \mu\text{m}$ ,  $V/V_{th} = 1.8$

### 4.3.3 Comportamento em relação à diferença de potencial

Em relação à diferença de potencial, o sistema apresenta uma dependência moderada. Para ancoramentos mais fracos, ela é um pouco maior e também aumenta suavemente com a espessura da célula. Esses resultados podem ser vistos na figura 4.20.

O aumento no parâmetro de *pretilt* reduz a dependência dos tempos de relaxamento em relação à diferença de potencial. Em grandes *pretilts* e em pequenas espessuras, os tempos de relaxamento são aproximadamente constantes para pequenas diferenças de potencial.

No caso de grandes espessuras e *pretilts*, o sistema inicialmente tem seu tempo de relaxação reduzido com o aumento do potencial, no entanto, depois de certo valor de diferença de potencial, ele começa a aumentar. Esse comportamento já havia sido reportado na literatura na referência [24] para ancoramentos fortes, mas aqui encontramos esse efeito muito mais pronunciado para valores mais altos de *pretilt* e para ancoramentos fracos. Esses resultados podem ser visualizados na figura 4.21.

Em relação ao desvio relativo, na figura 4.18, já constatamos que para ancoramento

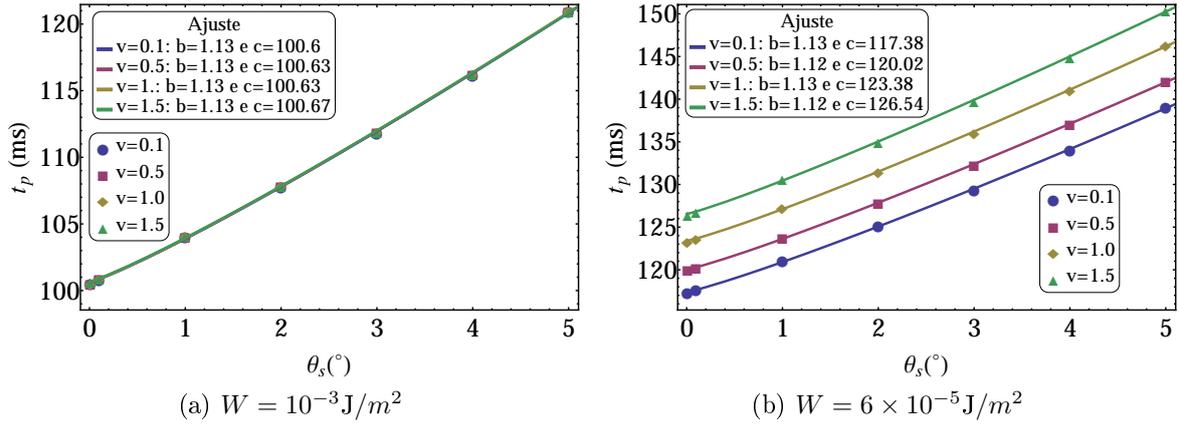


Figura 4.19: Tempos de relaxação de fase por *pretilt* e ajuste da curva  $f(\theta_s) = a\theta_s^b$  para  $d = 9 \mu\text{m}$ ,  $V/V_{th} = 1.8$ .

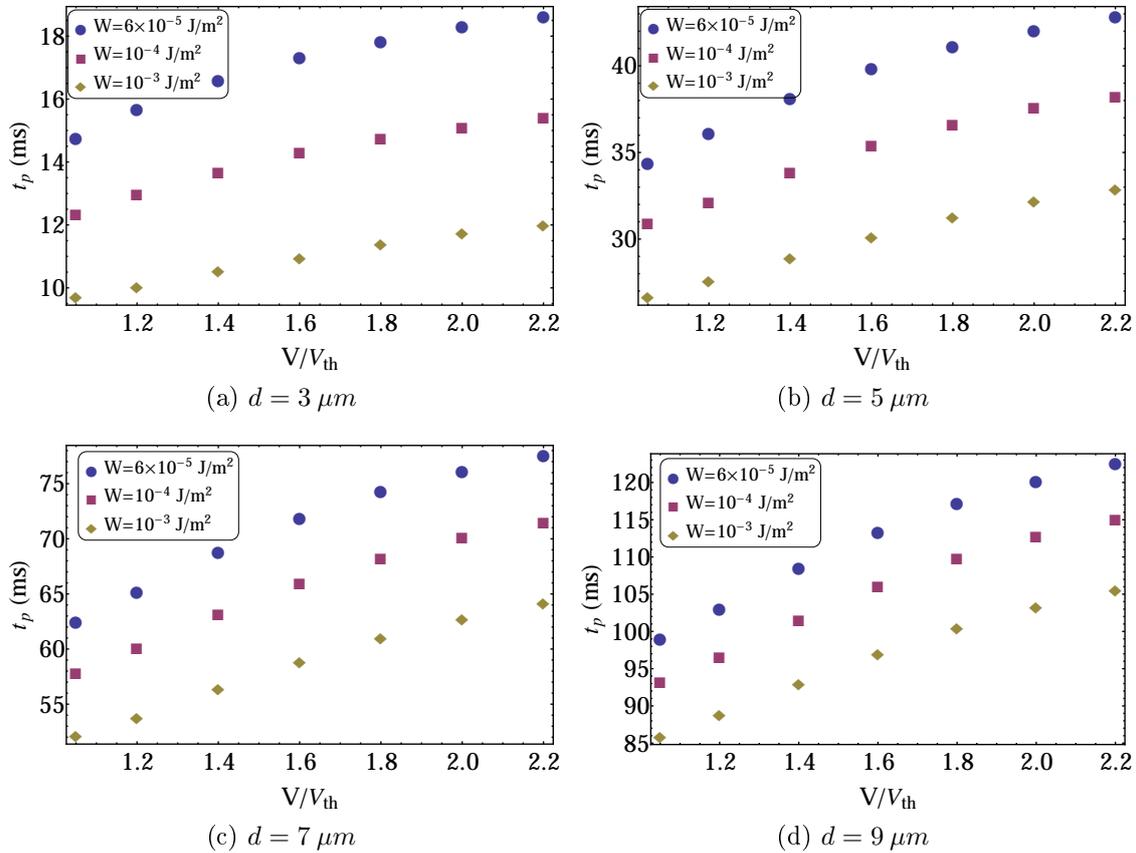


Figura 4.20: Tempos de relaxação de fase por diferença de potencial para  $v = 0.1$  e  $\theta_s = 0.01^\circ$ .

forte, independentemente da diferença de potencial, o sistema não apresenta desvios relativos expressivos.

Para ancoramentos fracos, o sistema apresenta maiores desvios relativos para altas diferenças de potencial. Na figura 4.22, podemos ver que, para a espessura de  $d = 3 \mu\text{m}$ , os desvios relativos são da ordem do tempo de relaxamento do sistema. Quando a diferença de potencial atinge  $V = 2.2V_{th}$ , o valor do tempo de relaxamento quase dobra quando a

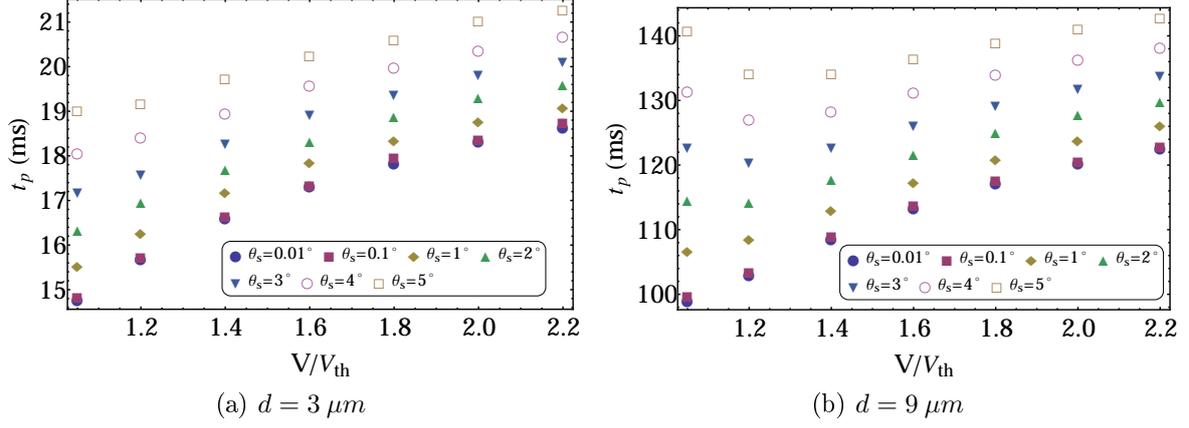


Figura 4.21: Tempos de relaxação de fase por diferença potencial para  $W = 6 \times 10^{-5} \text{J}/m^2$  e  $v = 0.1$ .

viscosidade de superfície varia de  $v = 0.1$  para  $v = 1.5$ .

Aumentando a espessura para  $d = 9 \mu m$ , ainda obtemos desvios relativos expressivos, principalmente para altas diferenças de potenciais, mas estes são muito menores quando comparados com os desvios obtidos para espessuras menores.

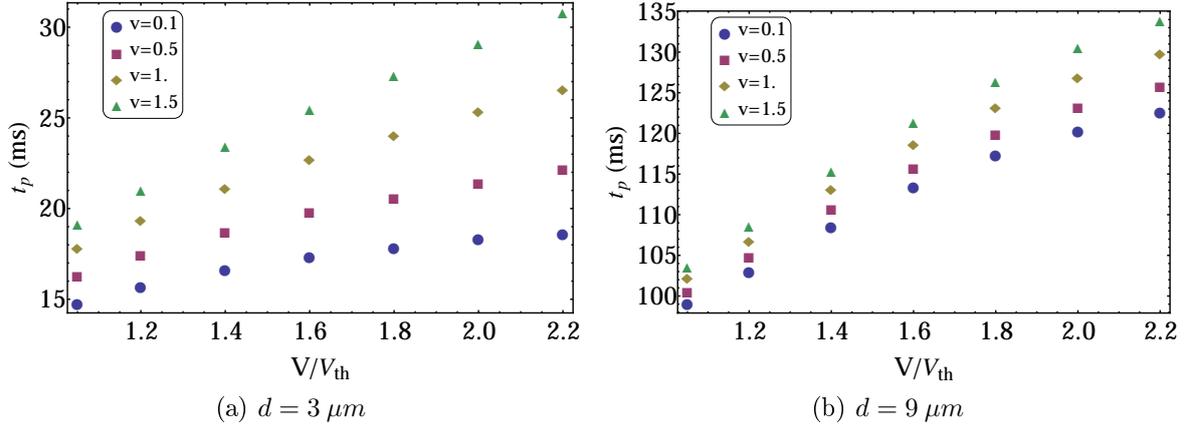


Figura 4.22: Tempos de relaxação de fase por diferença potencial para  $W = 6 \times 10^{-5} \text{J}/m^2$  e  $\theta_s = 0.01^\circ$ .

Quantitativamente, podemos avaliar a dimensão dos desvios relativos pelos valores expressos na tabela 4.12. Se a compararmos com a 4.11, podemos constatar que, no intervalo de parâmetros estudados, os desvios relativos do tempo de relaxação de fase dependem mais fortemente da diferença de potencial que do ângulo de *pretilt*.

	v=0.1	v=0.5	v=1.0	v=1.5
v=0.1	0.0%	12.8%	27.3%	41.1%
v=0.5	-11.4%	0.0%	12.9%	25.1%
v=1.0	-21.4%	-11.4%	0.0%	10.9%
v=1.5	-29.1%	-20.1%	-9.8%	0.0%

(a)  $d = 3 \mu m$

	v=0.1	v=0.5	v=1.0	v=1.5
v=0.1	0.0%	5.5%	11.8%	17.3%
v=0.5	-5.2%	0.0%	5.9%	11.1%
v=1.0	-10.5%	-5.6%	0.0%	4.9%
v=1.5	-14.7%	-10.0%	-4.7%	0.0%

(b)  $d = 5 \mu m$

	v=0.1	v=0.5	v=1.0	v=1.5
v=0.1	0.0%	2.9%	6.5%	9.6%
v=0.5	-2.8%	0.0%	3.4%	6.5%
v=1.0	-6.1%	-3.3%	0.0%	2.9%
v=1.5	-8.8%	-6.1%	-2.9%	0.0%

(c)  $d = 7 \mu m$

	v=0.1	v=0.5	v=1.0	v=1.5
v=0.1	0.0%	1.5%	3.4%	5.2%
v=0.5	-1.5%	0.0%	1.9%	3.6%
v=1.0	-3.3%	-1.8%	0.0%	1.7%
v=1.5	-4.9%	-3.5%	-1.7%	0.0%

(d)  $d = 10 \mu m$

Tabela 4.12: Desvios relativos dos valores de tempo de relaxação de fase em porcentagem, simulados com os parâmetros  $V/V_{th} = 1.4$ ,  $\theta_s = 0.01^\circ$  e  $W = 6 \times 10^{-5} \text{J/m}^2$ .

# Conclusões

Nesse trabalho, foi obtida, pela primeira vez na literatura, uma equação que relaciona o tempo de resposta de um nemático com a viscosidade de superfície, energia de ancoramento e a espessura.

Desenvolvemos um conjunto de algoritmos capazes de encontrar a distribuição de ângulos em função do tempo em uma célula de cristal líquido nemático e com eles, estudamos os tempos de relaxação do sistema.

Analisando o comportamento do sistema, confirmamos que os tempos de relaxamento do diretor evoluem como uma lei de potência em relação à espessura com um expoente entre 2 e 1, em que 2 é atingido quando o ancoramento é forte e 1 quando ele é muito fraco. Esse expoente também mostrou dependência em relação à viscosidade de superfície: quanto maior ela for, menor é o expoente.

Também comparamos os resultados numéricos com modelos teóricos utilizados para modelar sistemas com *pretilt*. Constatamos que o sistema evolui de forma aproximadamente linear em relação ao ângulo de *pretilt*. Analisando o sistema como uma lei de potência nesse ângulo, verificamos que o expoente é mais próximo de 1 para ancoramentos fortes. Nesse caso, a viscosidade de superfície tem pouco efeito sobre o expoente do crescimento, mas o termo linear apresenta forte dependência em relação a esse parâmetro.

Em relação à viscosidade de superfície, quando o ancoramento é do tipo forte, o sistema não apresenta dependência nesse parâmetro. Entretanto, mostramos que, quando o ancoramento é do tipo fraco, a dependência do sistema é muito forte, principalmente se a espessura é pequena, tomando a diferença de potencial alta e o ângulo de *pretilt* elevado.

Os tempos de relaxamento óticos também foram analisados sob as mesmas condições. Em relação à espessura, confirmamos que esses tempos evoluem com um expoente entre 2 e 1, sendo 2 obtido quando o ancoramento é do tipo forte e 1 quando ele é do tipo fraco. Assim como no caso anterior, esse expoente é menor quando a viscosidade de superfície aumenta.

Em relação ao *pretilt*, os tempos óticos evoluem de forma aproximadamente linear. Conforme a diferença de potencial aumenta, o expoente do crescimento também é elevado.

Por fim, a dependência dos tempos de relaxamento ótico em relação à viscosidade de superfície pode ser significativa dependendo dos parâmetros envolvidos. Para ancoramento forte, ela é quase inexistente, para ancoramento fraco essa dependência é forte, principalmente para pequenas espessuras. Grandes ângulos de *pretilt* e altas diferenças de potencial aumentam a dependência dos tempos óticos em relação à viscosidade de superfície.

Os tempos de relaxamento de fase possuem comportamento muito semelhante aos demais tempos do sistema, com a diferença que, em geral, a dependência desses tempos em relação aos parâmetros estudados é ligeiramente mais forte que os demais.

O comportamento em relação à espessura se repete como nos demais. Ele cresce com um expoente variando de 2 a 1, em que 2 é obtido para ancoramento forte e 1 para

ancoramento fraco. Esse expoente é menor para viscosidades de superfícies altas. Em relação ao *pretilt*, o crescimento é aproximadamente linear e, diferentemente dos tempos óticos, o expoente não possui grandes variações para altas diferenças de potencial.

A dependência em relação à viscosidade de superfície é alta para ancoramentos fracos e quase inexistente para ancoramentos fortes. A dependência é forte quando a espessura da célula é pequena, o ângulo de *pretilt* possui valor elevado e a diferença de potencial é alta.

Esses resultados são de grande importância prática. A partir deles, sabemos sob quais condições a viscosidade de superfície é um parâmetro determinante para o comportamento do sistema. Em especial, destacamos o efeito desse parâmetro para pequenas espessuras.

Atualmente, a indústria de *displays* tem reduzido a espessura da célula para diminuir o tempo de resposta. Em algumas células como a *IPS*, a voltagem crítica para ocorrer a transição de Fréederickzs é elevada. Dessa forma, a redução do ancoramento se faz necessária para a operação desse tipo de *display*. Para esse regime, a viscosidade de superfície é um parâmetro muito importante.

Do ponto de vista experimental, ainda há poucos trabalhos na literatura sobre a viscosidade de superfície. Recentemente, foi encontrada uma forma de medi-la em cristais líquidos colestéricos [33] e, posteriormente, em nemáticos [34,35]. Neste caso, a técnica utilizada ainda restringe muito o tipo de ancoramento do sistema.

Apresentamos, nesse trabalho, portanto, as situações em que esse parâmetro é mais efetivo sobre os tempos de relaxamento do sistema e, assim, esperamos que ele auxilie o desenvolvimento experimental do assunto.

# Apêndice A

## Algoritmos desenvolvidos

Neste apêndice, podemos encontrar todos os algoritmos desenvolvidos para a execução desse trabalho em conjunto com alguns comentários e instruções de utilização.

### A.1 Distribuição do diretor

Este algoritmo resolve a equação dinâmica do diretor. Os parâmetros do cristal líquido e das características da célula são passados no início do programa na seção de declaração de variáveis.

A execução do algoritmo irá produzir os seguintes arquivos de saída:

- **timeoff**: nesse arquivo, encontramos as espessuras do *slab* e os tempos com os quais foi atingido o estado estacionário da equação (3.15) e, conseqüentemente, o tempo que se inicia o processo de decaimento;
- **\*um\_phase\_calc.dat**: nesse arquivo, temos os valores da diferença de fase por tempo calculados pela expressão (1.32) para as espessuras \*;
- **\*um\_Transmission\_time.dat**: nesse arquivo, dispomos dos valores da transmitância em função do tempo calculados pelo método de Jones para a espessura \*;
- **\*um\_angulos**: nesse arquivo, encontramos os valores dos ângulos  $\theta$  em função de  $t$ . Os passos temporais estão separados por uma linha em branco e uma linha comentada com # (comentário padrão do `gnuplot`).

Esse código foi escrito na linguagem de programação FORTRAN, versão 95. Para executá-lo, precisamos inseri-lo em um arquivo de texto puro (*plain text*) e compilá-lo com um compilador de FORTRAN. Recomendamos o uso do compilador Gfortran para o qual esse algoritmo foi originalmente desenhado. O uso de outros compiladores pode causar erros de incompatibilidade.

#### Frank\_Solver.f90

```
1 Program Frank_Solver
2 Implicit None
3
4 Real*8 :: Pretilt=000
```

```

5 Real*8 :: wp=000
6 Real*8 :: k11=16.7, k33=18.1
7 Real*8 :: bvisc=186.0, vv=000
8 Real*8 :: dt=0.0005, timepasso=0.1
9 Real*8 :: epara=3.6_8, eperpa=7.8_8
10 Real*8 :: n0=1.4774_8, ne=1.5578_8
11 Real*8 :: lamb=0.550_8
12 Real*8 :: v_vc=000
13 Real*8, allocatable, dimension(:) :: theta, tatheta, ele_energy_var
14 Real*8, allocatable, dimension(:) :: elastic_energy_var
15 Integer*4 :: n, ii, i, Layers(1:9)=(/50,50,70,70,70,80,80,90,100/)
16 Real*8, Parameter :: Pi=3.14159
17 Real*8 :: tinit, dz, d, time, maxeuler, h, finit
18 Real*8 :: deltaE, v, timeprint, phase, svisc, hs
19 Complex*16 :: T
20 character*2 :: dchar(1:9)=(/"_2", "_3", "_4", "_5", "_6", "_7", "_8", "_9", "10"/)
21
22 open(10, file="timeoff", status="replace")
23
24 do ii=1,9
25
26     finit=Pi*45./180.
27     tinit=Pi*pretilt/180.
28     d=ii+1
29     n=layers(ii)
30     dz=d/n
31     Allocate (theta(0:n), tatheta(0:n))
32     Allocate (ele_energy_var(0:n), elastic_energy_var(0:n))
33     theta=tinit
34     time=0
35     v=2.19*v_vc
36     tatheta=0
37     maxeuler=1.0
38     svisc=d*bvisc*vv
39     h=dt/bvisc
40     hs=dt/svisc
41     deltaE=eparpa-eperpa
42     time=0
43     timeprint=0
44     Print*, d
45
46 Open(20, file=adjustl(dchar(ii))/"um_Transmission_time.dat"), status="replace")
47 Open(30, file=adjustl(dchar(ii))/"um_phase_calc.dat"), status="replace")
48 !Open(40, file=adjustl(dchar(ii))/"um_angles_space.dat"), status="replace")
49
50 field_on:Do while (maxeuler .gt. 0.0001)
51
52     call free_energy(theta, k11, k33, dz, n, elastic_energy_var, wp, tinit)
53
54     call electric_energy(theta, v, eperpa, deltaE, n, ele_energy_var)
55
56     Forall(i=0:n) tatheta(i)=elastic_energy_var(i)+&
57                 & ele_energy_var(i)
58
59     Forall(i=1:n-1) theta(i)=theta(i)+h*tatheta(i)
60     theta(0)=theta(0)+hs*tatheta(0)
61     theta(n)=theta(n)+hs*tatheta(n)
62     time=time+dt

```

```

63
64   if(time .gt. timeprint) then
65       call transmitancia (theta ,finit ,dz ,n,T)
66       call calcphase (theta ,n,dz ,phase ,n0 ,ne ,lamb)
67       write(20,*) time, Real(T)
68       write(30,*) time, phase
69       ! call print_theta(theta ,dz ,n ,time)
70       timeprint=timeprint+timepasso
71   end if
72
73       maxeuler=maxval(dabs(tatheta))
74
75 end do field_on
76
77 maxeuler=1.0
78 call transmitancia (theta ,finit ,dz ,n,T)
79 call calcphase (theta ,n,dz ,phase ,n0 ,ne ,lamb)
80 write(30,*) time, phase
81 write(20,*) time, Real(T)
82 write(10,*) ii+1, time
83 call print_theta(theta ,dz ,n ,time)
84
85 field_off:Do while (maxeuler .gt. 0.01)
86
87     call free_energy(theta ,k11 ,k33 ,dz ,n ,elastic_energy_var ,wp ,tinit)
88
89     tatheta=elastic_energy_var
90
91     theta(1:n-1)=theta(1:n-1)+h*tatheta(1:n-1)
92     theta(0)=theta(0)+hs*tatheta(0)
93     theta(n)=theta(n)+hs*tatheta(n)
94     time=time+dt
95
96     if(time .gt. timeprint) then
97         call transmitancia (theta ,finit ,dz ,n,T)
98         call calcphase (theta ,n,dz ,phase ,n0 ,ne ,lamb)
99         write(20,*) time, Real(T)
100        write(30,*) time, phase
101        ! call print_theta(theta ,dz ,n ,time)
102        timeprint=timeprint+timepasso
103    end if
104
105        maxeuler=maxval(dabs(tatheta))
106
107 end do field_off
108
109
110 deallocate(theta ,tatheta ,ele_energy_var ,elastic_energy_var)
111 close(40)
112 close(30)
113 close(20)
114 end do
115
116
117 close(10)
118
119 contains
120

```

```

121 Subroutine print_theta(theta,dz,n,time)
122 Implicit None
123 Integer*4, Intent(in) :: n
124 Real*8, Intent(in) :: theta(0:n), dz,time
125 Integer*4 :: i
126 Real*8, Parameter :: pi=3.14
127
128
129 write(40,*)
130 write(40,*) "#time=", time
131
132 Do i=0,n
133
134   write(40,*) i*dz, theta(i)*180./pi
135 end do
136 end subroutine
137
138 Subroutine calcphase(theta,n,dz,phase,n0,ne,lamb)
139 Implicit None
140 Integer*4, Intent(in) :: n
141 Real*8, Intent(in) :: theta(0:n),dz,n0,ne,lamb
142 Real*8, Intent(out) :: phase
143 Real*8 :: parcial
144 Integer*4 :: i
145
146 parcial=n0*ne/dSqrt((ne**2)*(dcos(theta(0)))**2+&
147   &(n0**2)*(dsin(theta(0)))**2)-&
148   &n0*ne/dSqrt((ne**2)*(dcos(theta(n)))**2+&
149   &(n0**2)*(dsin(theta(n)))**2)
150
151 do i=1,n-1,2
152
153   parcial=parcial+ 4.*(n0*ne/dSqrt((ne**2)*(dcos(theta(i)))**2 +&
154     &(n0**2)*(dsin(theta(i)))**2)-n0)+ &
155     & 2.*(n0*ne/dSqrt((ne**2)*(dcos(theta(i+1)))**2+&
156     &(n0**2)*(dsin(theta(i+1)))**2)-n0)
157
158 end do
159
160 phase=2.*parcial*dz/(3.*lamb)
161
162 end Subroutine
163
164
165 Subroutine transmitancia(theta,finit,dz,n,T)
166 Implicit None
167 Integer*4,Intent(in) :: n
168 Real*8,intent(in) :: finit ,theta(0:n),dz
169 Complex*16,Intent(out) :: T
170 Complex*16 :: Sistema(2,2)
171 Complex*16 :: Ei(2)=(/(1,0),(0,0)/)
172 Complex*16 :: an(2,2)=Reshape(/(0,0),(0,0),(0,0),(1,0)/),(/2,2/))
173 Complex*16 :: pol(2,2)=Reshape(/(1,0),(0,0),(0,0),(0,0)/),(/2,2/))
174 Complex*16 :: r1(2,2),r(2,2),ret(2,2),Ef(2)
175 Real*8 :: n0=1.4774_8, ne=1.5578_8, lamb=0.550_8
176 Real*8 :: pi=3.14159_8
177 Real*8 :: nep
178 integer*4 :: kk

```

```

179
180
181 Sistema=Reshape ((/ (1,0) ,(0,0) ,(0,0) ,(1,0) /), (/2,2/))
182 r1(1,1)=cplx(cos(finit),0,Kind=8)
183 r1(2,1)=cplx(-sin(finit),0,Kind=8)
184 r1(1,2)=cplx(sin(finit),0,Kind=8)
185 r1(2,2)=cplx(cos(finit),0,Kind=8)
186
187 r=transpose(r1)
188
189 Do kk=0,n
190
191   nep=(n0*ne)/(sqrt((ne**2)*((dcos(theta(kk)))**2)+&
192     &(n0**2)*((dsin(theta(kk)))**2)))
193
194   ret(1,1)=cplx(Cos(pi*(nep-n0)*dz/lamb),-sin(pi*(nep-n0)*dz/lamb),kind=8)
195   ret(2,1)=cplx(0,0,kind=8)
196   ret(1,2)=cplx(0,0,kind=8)
197   ret(2,2)=cplx(Cos(pi*(nep-n0)*dz/lamb),sin(pi*(nep-n0)*dz/lamb),kind=8)
198
199   sistema=matmul(r,matmul(ret,matmul(R1,Sistema)))
200 end do
201
202 Ef=matmul(an,matmul(sistema,(matmul(pol,Ei))))
203
204 T=Conjg(Ef(1))*Ef(1)+Conjg(Ef(2))*Ef(2)
205
206 end subroutine
207
208 Subroutine free_energy(theta,k11,k33,dz,n,elastic_energy_var,wp,tinit)
209 Implicit None
210 Integer*4 :: n
211 Real*8, intent(in) :: k11,k33,theta(0:n),dz,wp,tinit
212 Real*8, intent(out) :: elastic_energy_var(0:n)
213 Real*8 :: dtheta,d2theta
214
215 do i=1,(n-1)
216
217   dtheta=(theta(i+1)-theta(i-1))/(2.*dz)
218   d2theta=(theta(i+1)+theta(i-1)-2.*theta(i))/(dz**2)
219
220   elastic_energy_var(i)=&
221     &dtheta**2*(k11 - k33)*dCos(theta(i))*dSin(theta(i))&
222     &+d2theta*(k11*dSin(theta(i))**2 + k33*dCos(theta(i))**2)
223
224 end do
225
226 dtheta=(theta(1)-theta(0))/dz
227 elastic_energy_var(0)=dtheta*k33*dCos(theta(i))**2 + &
228   &(wp*dSin(2*(tinit - theta(i))))/2. + dtheta*k11*dSin(theta(i))**2
229
230 dtheta=(theta(n)-theta(n-1))/dz
231 elastic_energy_var(n)=(wp*dSin(2*(tinit - theta(i))))/2. - &
232   &dtheta*(k33*dCos(theta(i))**2 + k11*dSin(theta(i))**2)
233
234 end subroutine
235
236 Subroutine electric_energy(theta,v,eperpa,deltaE,n,ele_energy_density)

```

```

237 Implicit None
238 Integer, intent(in) :: n
239 Real*8, intent(in) :: v, eperpa, deltaE, theta(0:n)
240 Real*8, Intent(out) :: ele_energy_density(0:n)
241 Real*8 :: invsum, sig, e0=8.85
242 Integer*4 :: i
243
244 ele_energy_density=0
245
246 invsum=1./((eperpa+deltae*(dcos(theta(0)))**2) &
247           &-1./((eperpa+deltae*(dcos(theta(n)))**2)
248
249 do i=1,n-1,2
250
251     invsum=Invsum+4./((eperpa+deltae*(dcos(theta(i)))**2)+&
252                    & 2./((eperpa+deltae*(dcos(theta(i+1)))**2)
253
254 end do
255
256 sig=3.*v*e0/(dz*invsum)
257
258
259 do i=1,(n-1)
260
261 ele_energy_var(i)= -(deltae*sig**2*cos(theta(i))*sin(theta(i)))/&
262                   & (e0*(eperpa + deltae*cos(theta(i)))**2)**2)
263
264 end do
265
266 end subroutine
267
268 end program

```

---

## A.2 Tempos de relaxamento ótico

Nesta seção, apresentamos o algoritmo que encontra os tempos de relaxamento ótico baseado nos transientes de transmitância. Diferentemente do algoritmo A.1, ele não usa parâmetros, em seu lugar, é preciso passar os arquivos `*um_Transmission_times.dat`.

Na primeira linha do código, é determinado o endereço da pasta principal, onde as subpastas devem estar localizadas. Entre as linhas 2 e 6, são determinadas quais subpastas devem ser inspecionadas. Na linha 12, é definida a ordem que cada pasta será inspecionada.

De saída, será gerado um arquivo `optical_thickness.dat` em cada pasta inspecionada. Nele encontramos, na primeira coluna, as espessuras (em  $\mu m$ ) e, na segunda coluna, seus respectivos tempos óticos (em  $ms$ ).

Este código foi escrito em um *script* que pode ser executado em um notebook ou diretamente pelo *kernel* do MATHEMATICA em um terminal.

### `optical_times_all.m`

```

1 (* :: Package :: *)
2

```

```

3  dirr = "/home/rfsouza/ultimoteste";
4  vvcs = {" /v_vc=1.05", "/v_vc=1.2", "/v_vc=1.4", "/v_vc=1.6",
5         "/v_vc=1.8", "/v_vc=2.0", "/v_vc=2.2"};
6  viscosities = {" /vv=0.1", "/vv=0.5", "/vv=1.0", "/vv=1.5"};
7  anchorings = {" /wp=1000", "/wp=100", "/wp=60"};
8  pretilt = {" /Pretilt=0.1", "/Pretilt=1", "/Pretilt=2", "/Pretilt=3", "/Pretilt=5"};
9  SetDirectory[ dirr ];
10 Do[
11   Do[
12    Do[
13     directory =
14      dirr <> pretilt [[ ll ]] <> viscosities [[ oo ]] <> anchorings [[ pp ]] <>
15      vvcs [[ qq ]];
16     SetDirectory[ directory ];
17     If[ Directory[] == directory ,
18      Print[ Directory [] ];
19      names = {"2um_Transmission_time.dat", "3um_Transmission_time.dat",
20             "4um_Transmission_time.dat", "5um_Transmission_time.dat",
21             "6um_Transmission_time.dat", "7um_Transmission_time.dat",
22             "8um_Transmission_time.dat", "9um_Transmission_time.dat",
23             "10um_Transmission_time.dat"};
24      timeoff = Import["timeoff", "table" ][[;; , 2]];
25      espessuras=Import["timeoff","table" ][[;; , 1]];
26      respopt = {};
27     Do[
28      Clear[ponto];
29      Print[names [[ ii ]]];
30      maxtransmission = Max[Import[names [[ ii ]]][[;; , 2]]];
31      transmission =
32      Map[{#[[1]], #[[2]]/maxtransmission} &, Import[names [[ ii ]]]];
33      Do [If[transmission [[ kk, 2]] <= 0.1, ponto = kk, Break[]], {kk,
34      Length[transmission], 0, -1}];
35      j = transmission [[ ponto - 5 ;; ponto + 5]];
36      m = Interpolation[j, InterpolationOrder -> 2];
37      l = FindRoot[m[y] == 0.1, {y, j [[5, 1]]}];
38      otictimes = (Part[l, 1, 2] - timeoff [[ ii ]]);
39      AppendTo[respopt, {espessuras [[ ii ]], otictimes}],
40      {ii, 1, Length[timeoff]};
41      ListPlot[respopt]
42      Export["opticaltimes_thickness.dat", respopt]
43      SetDirectory[ dirr ]
44      , Null]
45      , {oo, 1, Length[viscosities]}]
46      , {pp, 1, Length[anchorings]}]
47      , {qq, 1, Length[vvcs]}]
48      , {ll, 1, Length[pretilt]}]
49

```

---

### A.3 Tempos de relaxamento do diretor e de fase

Nesta seção, apresentamos o algoritmo que encontra os tempos de relaxamento do diretor e de fase. Assim como o algoritmo anterior, ele não usa parâmetros, em seu lugar, é preciso passar os arquivos \*um\_Transmission\_times.dat que contêm a transmitância da célula em função do tempo.

Nas primeiras linhas, são determinadas as pastas e subpastas da mesma forma que foi feito para o algoritmo A.2.

O *design* dele necessita de alguns detalhes adicionais que serão abordados brevemente. Primeiro, é importante para o cálculo da fase que saibamos corretamente onde estão localizados os picos e os vales da curva de fase pelo tempo. Para isso, antes de iniciar o cálculo da fase, o algoritmo isola os picos e os vales da curva utilizando o seguinte processo:

- Primeiro, o programa compara cada ponto com seus dois vizinhos laterais: caso ele seja maior que ambos, ele será classificado como pico, caso seja menor, como vale;
- Devido a pequenas flutuações, podem haver vales e picos localizados em locais inadequados. Corrigimos isso removendo os vales cuja transmitância seja superior a 0.1 e os picos cujo valor de transmitância seja inferior a 0.9;
- O segundo processo falha em remover os vales localizados na parte final do relaxamento. Para corrigir esse problema, removemos os últimos "vales" até que o último extremo seja um "pico". Dessa forma, temos todos os pontos localizados adequadamente.

Por meio desse processo, podemos isolar todos os picos e encontrar a diferença de fase para todos os pontos. Obtida a diferença, podemos localizar o valor que mais se aproxima de  $e^{-2}$ , que será o tempo de relaxamento  $t_p$ .

Por fim, calculamos os tempos de relaxamento do diretor pelo processo descrito na seção 3.4.

Esse código também foi escrito em um *script* e pode ser executado em um *notebook* do MATHEMATICA ou diretamente pelo *kernel* deste *software* em um terminal.

### transmission\_time\_all.m

```

1 (* ::Package:: *)
2
3 dirr= "/home/rfsouza/ultimoteste"
4 pretilt = {"Pretilt=0.01", "Pretilt=0.1", "Pretilt=1", "Pretilt=2", "Pretilt=3",
5           "Pretilt=4", "Pretilt=5"}
6 vv = {"vv=0.1", "vv=0.5", "vv=1.0", "vv=1.5"}
7 ww = {"wp=1000", "wp=100", "wp=60"}
8 vvc = {"v_vc=1.05", "v_vc=1.2", "v_vc=1.4", "v_vc=1.6", "v_vc=1.8",
9        "v_vc=2.0", "v_vc=2.2"};
10 For[qq = 1, qq <= Length[pretilt], qq++,
11     For[pp = 1, pp <= Length[vv], pp++,
12         For[oo = 1, oo <= Length[ww], oo++,
13             Do[
14                 directory =
15                 dirr <> pretilt[[qq]] <> vv[[pp]] <>
16                 ww[[oo]] <> vvc[[ll]];
17                 SetDirectory[directory];
18                 If[Directory[]==directory,
19                     Print[directory];
20                 names = {"2um_Transmission_time.dat", "3um_Transmission_time.dat",
21                         "4um_Transmission_time.dat", "5um_Transmission_time.dat",
22                         "6um_Transmission_time.dat", "7um_Transmission_time.dat",
23                         "8um_Transmission_time.dat", "9um_Transmission_time.dat",

```

```

24     "10um_Transmission_time.dat"};
25     timeoff = Import["timeoff", "Table"];
26     times = {};
27     phasetimes = {};
28     Do[
29     dphases[ii] = {};
30     extremus = {};
31     dados = Import[names[[ii]], "table"];
32     risedata = DeleteCases[dados, x_ /; x[[1]] > timeoff[[ii, 2]];
33     Subscript[i, 0] = Max[Map[#[[2]] &, risedata]];
34     Subscript[T,
35     rise] = (risedata[[Position[dados,
36     Nearest[Map[#[[2]] &, risedata],
37     Subscript[i, 0]*0.9][[1]][[1, 1]],
38     1]]) - (risedata[[Position[dados,
39     Nearest[Map[#[[2]] &, risedata],
40     Subscript[i, 0]*0.1][[1]][[1, 1], 1]]);
41     dtransmission =
42     Map[{#[[1]] - timeoff[[ii, 2]], #[[2]]} &,
43     DeleteCases[dados, x_ /; x[[1]] < timeoff[[ii, 2]]]];
44
45     Do[If[(dtransmission[[jj, 2]] >= dtransmission[[jj - 1, 2]]) &&
46     (dtransmission[[jj, 2]] >= dtransmission[[jj + 1, 2]])],
47     AppendTo[extremus, {"pico", jj, dtransmission[[jj, 2]]}], Null];
48     If[(dtransmission[[jj, 2]] <=
49     dtransmission[[jj - 1, 2]]) && (dtransmission[[jj, 2]] <=
50     dtransmission[[jj + 1, 2]])],
51     AppendTo[extremus, {"vale", jj, dtransmission[[jj, 2]]}],
52     Null], {jj, 2, (Length[dtransmission] - 1)}];
53
54     extremus =
55     DeleteCases[extremus,
56     x_ /; (x[[1]] == "pico" &&
57     x[[3]] < 0.9 || (x[[1]] == "vale" && x[[3]] > 0.1));
58     If[Length[extremus] != 0,
59     While[Last[extremus][[1]] == "vale",
60     extremus = Delete[extremus, -1];
61     If[Length[extremus] == 0, Break[]]];
62     PrependTo[extremus, {"start", 0}];
63     If[Last[extremus][[1]] == "vale",
64     AppendTo[extremus, {"pico", Length[dtransmission]}],
65     AppendTo[extremus, {"vale", Length[dtransmission]}]];
66     m = Length[extremus] - 2;
67
68
69     If[extremus[[2, 1]] == "vale", n = 1, n = 2];
70     Do[Do[
71     If[OddQ[n],
72     AppendTo[
73     dphases[ii], {dtransmission[[kk,
74     1]], (2*ArcSin[Sqrt[dtransmission[[kk, 2]]]] + m*Pi)/
75     Pi}], AppendTo[
76     dphases[ii], {dtransmission[[kk,
77     1]], (2*ArcCos[Sqrt[dtransmission[[kk, 2]]]] + m*Pi)/
78     Pi]}], {kk, extremus[[jj, 2]] + 1,
79     extremus[[jj + 1, 2]]}];
80     n++; m--; {jj, 1, Length[extremus] - 1}];
81

```

```

82
83     tp = Cases[
84     dphases[ii], {_,
85     Nearest[Map[#[[2]] &, dphases[ii]],
86     dphases[ii][[1, 2]]*0.13533][[1]]][[1, 1]];
87
88     Subscript[\[Delta], 0] = dphases[ii][[1, 2]];
89     ln = Map[{#[[1]], Log[(Subscript[\[Delta], 0]/#[[2]])]} &,
90     dphases[ii]];
91     dataforfit = DeleteCases[ln, {x_ /; x > tp, _}];
92     f[y_] = Fit[dataforfit, {y}, y];
93     Subscript[\[Tau], 0] = 2/(f[2] - f[1]);
94
95
96
97     AppendTo[phasetimes, {timeoff[[ii, 1]], tp}];
98     AppendTo[times, {timeoff[[ii, 1]], Subscript[\[Tau], 0]}];
99     , {ii, 1, Length[names]}}];
100
101     Export["directortimes_thickness.dat", times, "table"];
102     Export["phasetimes_thickness.dat", phasetimes, "table"];
103
104     ,Null]
105 , {ll, 1, Length[vvc]}]]]]]

```

---

# Referências Bibliográficas

- [1] Z. Ge and S. T. Wu, *Transflective Liquid Crystal Displays* (Wiley Series in Display Technology. Wiley, 2010).
- [2] D. K. Yang and S. T. Wu, *Fundamentals of Liquid Crystal Devices* (Wiley Series in Display Technology. Wiley, 2006).
- [3] G. Barbero, I. Dahl and L. Komitov, J. Chem. Phys. **130**, 174902 (2009).
- [4] G. E. Durand and E. G. Virga, Phys. Rev. E **59**, 4137 (1999).
- [5] A. M. Sonnet, E. G. Virga and G. E. Durand, Phys. Rev. E **62**, 3694 (2000).
- [6] G. Barbero and L. Pandolfi, Phys. Rev. E **79**, 051701 (2009).
- [7] G. Barbero and L. R. Evangelista, *An Elementary Course on the Continuum Theory for Nematic Liquid Crystals* (Series on Liquid Crystals. World Scientific, 2001).
- [8] R. S. Zola, *Effects of Electric Field, Surface Alignment and Guest Materials in Cholesteric Liquid Crystals*. Tese de doutorado, Kent State University, 2012.
- [9] B. F. de Oliveira, *Estudos numéricos da formação e dinâmica de defeitos topológicos em cristais líquidos nemáticos*. Tese de doutorado, Universidade Federal da Paraíba, 2012.
- [10] A. L. Alexe-Ionescu, G. Barbero and I. Lelidis, Phys. Rev. E **66**, 061705 (2002).
- [11] E. K. Lenzi and G. Barbero, Europhys. Lett. **88**, 58003 (2009).
- [12] P. A. Santoro, A. T. Silva, E. K. Lenzi, and L. R. Evangelista, Liq. Cryst. **39**, 647 (2012).
- [13] G. Barbero, L. R. Evangelista and I. Lelidis, Phys. Rev. E **67**, 051708 (2003).
- [14] Z. Ge, T. X. Wu, R. Lu, X. Zhu, Q. Hong and S.-T. Wu, J. Display Technol. **1** 194 (2005).
- [15] G.-D. Lee, P. J. Bos, S. H. Ahn and K. H. Kim, Phys. Rev. E **67**, 041715 (2003).
- [16] Y. H. Choi, K. Kim, S. Ji, J. Yang, B. Kang, G.- D. Lee, H. C. Choi and S. H. Lee, J. Korean Phys. Soc **51**, 1700 (2007).
- [17] W.-S. Kang, W.-Y. Joo, S.-Y. Hur, H.-Y. Han, G.-D. Lee, B. Jeong and H.-J. Youn, J. Korean Phys. Soc **57**, 752 (2010).

- [18] G. Barbero and L. R. Evangelista, *Adsorption Phenomena And Anchoring Energy in Nematic Liquid Crystals* (The Liquid Crystals Book Series. Taylor & Francis, 2006).
- [19] Y. Cui, R. S. Zola, Y.-C. Yang and D.-K. Yang, *J. of Appl. Phys.* **111**, 063520 (2012).
- [20] J. D. Jackson, *Classical Electrodynamics Third Edition* (Wiley, 1998).
- [21] M. Kleman and O. D. Lavrentovich, *Soft Matter Physics: An Introduction. Partially Ordered Systems* (Springer, 2003).
- [22] S. Singh and D. A. Dunmur, *Liquid Crystals: Fundamentals* (World Scientific, 2002).
- [23] A. I. Derzhanski and A. G. Petrov, *Acta. Phys. Pol. A* **55**, 747 (1979).
- [24] H. Wang, T. X. Wu, X. Zhu and S.-T. Wu, *J. Appl. Phys.* **95**, 5502 (2004).
- [25] S. T. Wu and D. K. Yang, *Reflective liquid crystal displays* (Wiley-SID series in display technology, Wiley, 2001).
- [26] I.-C. Khoo, *Liquid Crystals* (Wiley Series in Pure and Applied Optics, Wiley, 2007).
- [27] S. E. Koonin and D. Meredith, *Computational physics (FORTRAN version)* (Advanced book program. Addison-Wesley, 1990).
- [28] X. Nie, R. Lu, H. Xianyu, T. X. W and S.-T. Wu, *J. Appl. Phys.* **101**, 103110 (2007).
- [29] L.-C. Chien, V. Borshch and J.-Y. Hwang, *Switching surface-stabilized liquid crystal cells*, Patente número WO 2011/102 892 A1 (2011).
- [30] R. M. S. Ataalla, G. Barbero, and L. Komitov, *J. Appl. Phys.* **113**, 164501 (2013).
- [31] R. T. de Souza, E. K. Lenzi and Luiz Roberto Evangelista. *Liq. Crys* **37**, 1559 (2010).
- [32] X. Nie, H. Xianyu, R. Lu, T. X. Wu and S.-T. Wu, *J. Display Technol.* **3**, 280 (2007).
- [33] P. Oswald, A. Dequidt and A. Żywociński, *Phys. Rev. E* **77**, 061703 (2008).
- [34] P. Oswald, G. Poy, F. Vittoz and V. Popa-Nita. *Liq.Crys.* **40**, 734 (2013).
- [35] P. Oswald, *Europhys. Lett.* **100**, 26001 (2012).