

# **UNIVERSIDADE ESTADUAL DE MARINGÁ**

*PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA*

---

**Roseli Fatima Scramim Lima**

## **Problemas de Contorno em uma Célula Nemática Limitada por Superfícies Inomogêneas**

**Orientador: Prof. Dr. Luiz Roberto Evangelista**

Dissertação de mestrado apresentada à  
Universidade Estadual de Maringá para a  
obtenção do título de mestre em Física.

---

Maringá, março de 2001.

**Problemas de Contorno em uma Célula Nemática Limitada por Superfícies Inomogêneas**

by

A. U. Thor

B.S., University of California (1980)  
S.M., Massachusetts Institute of Technology (1984)

Submitted to the Department of Electrical Engineering and Computer Science  
in partial fulfillment of the requirements for the degrees of

Doctor of Philosophy

and

Master of Science

at the

UNIVERSITY OF NEW MEXICO

June 1999

© Remove to use default copyright from the style

The author hereby grants to University of New Mexico permission to reproduce and to distribute copies of this thesis document in whole or in part.

Signature of Author .....  
Department of Electrical Engineering and Computer Science  
13 May 1998

Certified by .....  
David Collis  
Director, Sound and Furry Laboratory  
Research Head

Certified by .....  
George D. Pearson  
Director, Technical Support  
Thesis Supervisor

Accepted by .....  
Arthur C. Clarke  
Chairperson, Department Committee on Graduate Students

# Conteúdo

<b>1</b>	<b>INTRODUÇÃO</b>	<b>5</b>
<b>2</b>	<b>PROPRIEDADES ELÁSTICAS DOS CRISTAIS LÍQUIDOS</b>	<b>8</b>
2.1	Cristais Líquidos: generalidades . . . . .	8
2.1.1	Termotrópicos . . . . .	10
2.1.2	Liotrópicos . . . . .	11
2.2	Densidade de energia elástica dos cristais líquidos nemáticos . . . . .	13
2.3	Deformações elásticas: splay, twist, bend . . . . .	18
2.4	Problema variacional . . . . .	19
2.4.1	Ancoramento forte . . . . .	19
2.4.2	Ancoramento fraco . . . . .	20
<b>3</b>	<b>PERFIL DO DIRETOR PARA DEFORMAÇÕES NO PLANO</b>	<b>22</b>
3.1	O meio semi-infinito . . . . .	22
3.2	Amostra de espessura $d$ . . . . .	26
<b>4</b>	<b>APLICAÇÕES: SUPERFÍCIES INOMOGÊNEAS</b>	<b>33</b>
4.1	Exemplos: Paredes de Orientação . . . . .	33
4.1.1	Direção fácil equivalente . . . . .	33
4.1.2	Paredes de orientação em amostras de espessura $d$ . . . . .	35
4.2	Distribuição periódica de eixos fáceis . . . . .	38

<b>5</b>	<b>COMPORTAMENTO DINÂMICO DA SUPERFÍCIE SOB A AÇÃO DE FORÇAS ENTRE DEFEITOS</b>	<b>48</b>
5.1	Casos especiais . . . . .	50
5.2	Energia elástica e força entre defeitos . . . . .	53
5.2.1	Efeito da força sobre o movimento da superfície . . . . .	53
<b>6</b>	<b>CONCLUSÃO</b>	<b>57</b>

**Problemas de Contorno em uma Célula Nemática Limitada por Superfícies**

**Inomogêneas**

by

A. U. Thor

Submitted to the Department of Electrical Engineering and Computer Science  
on 13 May 1998, in partial fulfillment of the  
requirements for the degrees of  
Doctor of Philosophy  
and  
Master of Science

**Resumo**

Replace with the thesis abstract

Research Head: David Collis

Title: Director, Sound and Furry Laboratory

Thesis Supervisor: George D. Pearson

Title: Director, Technical Support

# Capítulo 1

## INTRODUÇÃO

A descrição física dos cristais líquidos nemáticos é feita, normalmente, a partir da introdução de um diretor  $\vec{n}$ , que coincide com a orientação molecular média das moléculas que formam a fase[1]. Um problema de relevância na teoria elástica dos cristais líquidos nemáticos é a determinação do perfil do diretor, ou mais especificamente, da orientação molecular média em uma amostra, levando-se em conta os efeitos produzidos pelo substrato sólido que normalmente a limita. O problema também é relevante do ponto de vista experimental, pois uma orientação bem conhecida na superfície é de grande importância na fabricação de dispositivos práticos. Na ausência de campos externos,  $\vec{n}$  depende somente do tratamento dado à superfície da amostra. Torna-se, portanto, necessário investigar a orientação induzida pelo substrato sólido no meio nemático. Nos últimos anos, uma série de trabalhos ocupou-se do problema[2, 3, 4, 5] tanto do ponto de vista fenomenológico [6, 7] quanto do ponto de vista microscópico[8, 9]. Na maior parte desses trabalhos, a superfície é considerada como sendo uniforme, e caracterizada por uma direção fácil bem definida. Contudo, essa situação pode ser considerada como uma idealização excessiva, já que as superfícies reais nunca são homogêneas em larga escala, mesmo quando a sua composição química não varia[10]. Eis o motivo por que, mais recentemente, novos trabalhos foram dedicados à análise do problema na presença de superfícies inhomogêneas [11, 12, 13, 10, 14, 15, 16].

Neste trabalho, nós retomamos o modelo apresentado em [14, 15] e aplicado em[16, 17] para

formulá-lo em termos matemáticos mais precisos e abordar os problemas de contorno em uma geometria particular, mas representativa de uma série de situações experimentais relevantes. Nós determinamos, matematicamente, o comportamento do diretor em uma amostra líquido-cristalina limitada por superfícies planas, apresentando inomogeneidades na distribuição das direções fáceis. Os sistemas por nós considerados são tais que o diretor permanece no plano. Assim, o problema matemático consiste na busca de soluções para a equação de Laplace, obedecendo a condições de contorno de dois tipos, dependendo de a situação referir-se a ancoramento forte ou fraco. Os problemas de contorno clássicos que consideramos são o Problema de Dirichlet, onde o valor da função é especificado sobre o contorno e o problema misto, onde o valor da função e da derivada normal da função estão conectados sobre o contorno[18, 19].

Uma parte dos problemas tratados nesta monografia havia sido considerada na literatura recente (veja, em particular, as referências [10, 14, 15, 16, 17]) e serviram, aqui, para ilustrar a aplicabilidade do formalismo desenvolvido. Mesmo assim, devemos registrar alguns avanços representados por este trabalho. Em primeiro lugar vale a pena mencionar que a generalidade do tratamento foi preservada durante todo o trabalho. Além disso, o problema da distribuição periódica de eixos fáceis foi por nós resolvido de maneira exata para uma classe geral de distribuições representativas de possíveis situações experimentais. Nosso tratamento é mais geral do que aquele apresentado em[10] pois permite, efetivamente, considerar outros casos de interesse não contemplados naquela análise, como é o caso de uma célula bi-estável, que pode ser tratada no âmbito deste formalismo. Por fim, depois de retomar o cálculo da força entre defeitos, apresentado em[16, 20], nós investigamos o comportamento dinâmico de uma superfície livre que estivesse sob a ação exclusiva dessa força. A partir dessa análise, e de maneira sucinta, nós discutimos a possibilidade de que um tratamento teórico desta natureza possa servir como instrumento para a interpretação de um novo contexto experimental. Nesse contexto, a energia de ancoramento de uma amostra líquido-cristalina, limitada por superfícies inomogêneas, poderia ser detectada por um método que não requer a aplicação de campos externos. Esses métodos, como se demonstrou no passado[17], podem induzir o experimentador a conclusões conflitantes sobre a real natureza do ancoramento que caracteriza uma amostra.

Esta dissertação está organizada da seguinte maneira. No segundo capítulo apresentamos generalidades sobre os cristais líquidos e apresentamos, também, os elementos fundamentais da

teoria elástica que empregaremos em todo o trabalho. No terceiro capítulo desenvolvemos a apresentação do modelo teórico completo para a determinação do perfil do diretor. Chegamos, então, a um resultado genérico para esse perfil, tanto para uma amostra semi-infinita, quanto para uma amostra de espessura finita, em ambas as situações de ancoramento forte e fraco. No quarto capítulo apresentamos algumas aplicações do formalismo apresentado e resolvemos, de maneira exata, os problemas de contorno pertinentes ao caso de uma distribuição periódica de eixos fáceis na superfície. No quinto capítulo mostramos o surgimento de uma força entre linhas de defeitos, oriundas de uma particular forma de inomogeneidade superficial. Uma análise dinâmica do movimento dessas superfícies devido ao aparecimento dessa força também é apresentado. Algumas conclusões gerais são esboçadas na seqüência.

## Capítulo 2

# PROPRIEDADES ELÁSTICAS DOS CRISTAIS LÍQUIDOS

### 2.1 Cristais Líquidos: generalidades

Cristal líquido é uma fase intermediária da matéria, também chamada de mesofase. Ela pode ser encontrada entre o estado sólido cristalino, em que as moléculas possuem uma organização bem definida no espaço, e o estado líquido isotrópico, em que as moléculas ocupam posições aleatórias no espaço[1].

O cristal líquido apresenta propriedades encontradas na fase cristalina como, por exemplo, a birrefringência e a anisotropia óptica. Isso se deve ao fato de os cristais líquidos manterem uma certa ordem posicional das moléculas. Geralmente essas moléculas são alongadas e, exceto por influência de flutuações térmicas, elas se posicionam paralelas umas às outras na fase nemática. Embora livres para se moverem em todas as direções, como em um líquido comum, permanecem orientadas em torno de uma direção preferencial. Esta direção é representada por um vetor unitário  $\vec{n}(\vec{r})$ , chamado de *diretor* da fase nemática.

O parâmetro que determina essa orientação das moléculas é chamado Parâmetro de Ordem ( $S$ ) e, na fase nemática, foi definido por Tsvetkov[21] como:

$$S = \frac{1}{2} (3\langle \cos^2 \theta \rangle - 1),$$

onde  $\theta$  é o ângulo formado entre o eixo longo da molécula e o diretor  $\vec{n}(\vec{r})$ . Quando  $\theta = 0$ ,  $S = 1$ , que representa uma ordem orientacional perfeita e, quando  $\langle \cos^2 \theta \rangle = \frac{1}{3}$ ,  $S = 0$ , isto é,

$$\langle \cos^2 \theta \rangle = \int \cos^2 \theta \frac{d\Omega}{4\pi} = \frac{1}{4\pi} \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^\pi \cos^2 \theta \sin\theta d\theta = \frac{1}{3},$$

quando todas as direções são igualmente prováveis.

Pode-se definir também um parâmetro de ordem tensorial, de natureza macroscópica, cujas componentes são  $Q_{ij}$ , por meio da susceptibilidade magnética molecular. De acordo com de Gennes[1], esse tensor pode ser escrito na forma

$$Q_{ij} = G \left( \chi_{ij} - \frac{1}{3} \delta_{ij} \sum_k \chi_{kk} \right),$$

onde  $G$  é uma constante de normalização e  $\chi$  é o tensor susceptibilidade magnética. O parâmetro de ordem tensorial ( $Q_{ij}$ ) pode ser relacionado com o parâmetro de ordem escalar ( $S$ ), por meio da expressão

$$Q_{ij} = \frac{3}{2} S \left[ n_i n_j - \frac{1}{3} \delta_{ij} \right]. \quad (2.1)$$

Como regra geral, todos os tensores que caracterizam uma fase nemática, como, por exemplo, a permitividade dielétrica, a condutividade térmica, e outros, devem ser decompostos em termos dos elementos de simetria da fase. Tipicamente, pode-se efetuar a decomposição em termos das componentes de  $\vec{n}$ , da delta de Kronecker,  $\delta_{ij}$  e do tensor de Levi-Civita,  $\epsilon_{ijk}$ ; alternativa-mente, pode-se efetuar a decomposição em termos do parâmetro de ordem tensorial, da delta de Kronecker e do tensor de Levi-Civita[22]. Como veremos mais adiante, ao supormos que o parâmetro de ordem escalar é espacialmente constante, escreveremos a densidade de energia elástica em termos das derivadas primeiras do diretor  $\vec{n}$ . Isso permitirá que definamos uma densidade de energia elástica caracterizando a fase nemática, com a qual formularemos os problemas fundamentais a serem abordados nesta dissertação. Antes disso, porém, consideraremos outras propriedades gerais dos sistemas líquido-cristalinos.

Os cristais líquidos, em geral, são divididos em dois grupos: termotrópicos e liotrópicos.

### 2.1.1 Termotrópicos

São compostos por substâncias puras e a variação de temperatura é a principal causa do aparecimento da fase líquido-cristalina. Os cristais líquidos termotrópicos apresentam três mesofases: nemática, colestérica e esmética.

*Fase nemática:* as características essenciais dessa fase podem ser brevemente apresentadas como segue:

- a) as moléculas são, em geral, alinhadas com seus eixos longos paralelos uns aos outros definindo macroscopicamente uma direção preferencial. Nessa direção existe uma simetria rotacional; a fase é uniaxial, isto é, as direções  $\vec{n}$  e  $-\vec{n}$  são equivalentes;
- b) não há uma interação de longo alcance entre os centros de massa das moléculas permitindo que elas se movam livremente. Esta propriedade determina o carácter fluido da fase nemática;
- c) o eixo de simetria uniaxial não é polarizado apesar de as moléculas poderem ser polares.

*Fase colestérica:* forças intermoleculares podem favorecer um alinhamento entre as moléculas com um ângulo entre o eixo longo das moléculas e o diretor formando uma fase levemente distorcida, e assim diferente da nemática. Nessa fase, o diretor não é fixo no espaço, podendo girar de forma helicoidal. A distância de repetição dessa hélice é chamada de passo. A fase colestérica também é chamada de fase nemática chiral.

*Fase esmética:* é uma fase que ocorre a uma temperatura abaixo da temperatura das fases nemática e colestérica. Ela é mais viscosa que as outras e possui propriedades mecânicas semelhantes às dos sabões. Nessa fase há um aumento na ordem orientacional, bem como um aumento na ordem posicional das moléculas, além de uma organização dessas moléculas em camadas. É a fase mais próxima do estado sólido cristalino.

Os tipos mais comuns são os esméticos *A*, *B* e *C*. Na fase esmética *A* o diretor é perpendicular ao plano que define a camada, enquanto que no esmético *C* ele forma um ângulo diferente de  $\pi/2$  com esse plano. Nos esméticos *A* e *C* as moléculas se movem aleatoriamente dentro de cada camada, e não há ordem posicional dentro de cada plano. Já no esmético *B* as moléculas ocupam uma ordem posicional dentro da camada, acarretando uma menor fluidez do esmético *B* com relação aos esméticos *A* e *C*.

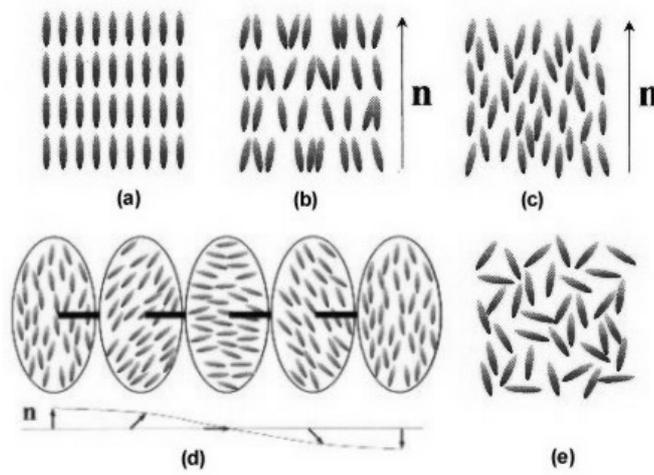


Figura 2-1: Esquema da ordem posicional das moléculas nas fases: (a) sólida; (b) esmética; (c) nemática; (d) colestérica; (e) líquida.

### 2.1.2 Liotrópicos

É a fase intermediária entre os estados sólido e líquido de soluções quimicamente compostas. O surgimento dessa fase depende tanto da variação da temperatura como da concentração da solução. As soluções mais usadas para a obtenção de liotrópicos são as misturas de fosfolipídios e água. Os fosfolipídios são formados por moléculas anfifílicas, isto é, moléculas que possuem uma parte polar, chamada cabeça (grupo de átomos que têm afinidade elétrica com o solvente) e uma parte não polar, em geral uma cadeia de hidrocarbono, chamada cauda. Os compostos que possuem moléculas anfifílicas são também chamados de surfactantes. Na presença do solvente

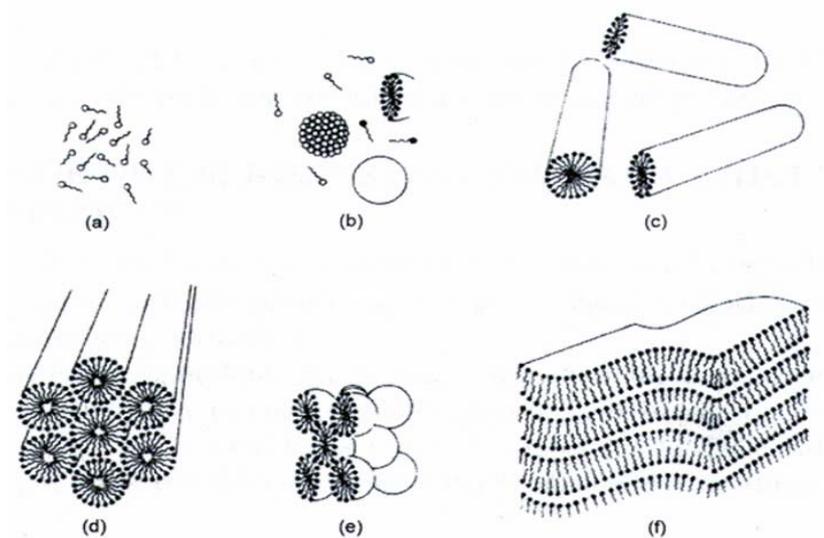
e numa concentração crítica, essas moléculas se agrupam de uma maneira peculiar formando o que se chama de *micela*. As micelas, dependendo da temperatura e da concentração, podem assumir várias formas, como a discótica e a cilíndrica.

Os cristais líquidos liotrópicos, em relação à ordem das moléculas, apresentam as mesofases hexagonal, lamelar e cúbica.

*Fase hexagonal:* apresenta-se quando a concentração da solução (dos surfactantes, por exemplo) é elevada (da ordem de aproximadamente 50%) e as moléculas anfífilas se combinam em estruturas grandes, em forma de uma haste cilíndrica, dando origem a uma estrutura hexagonal.

*Fase cúbica:* Pode-se encontrar entre a fase lamelar e a fase hexagonal, quando a concentração diminui. Apresenta as moléculas anfífilas formando esferas que se posicionam na forma de uma estrutura cúbica.

*Fase lamelar:* apresenta-se em concentrações não muito elevadas. As moléculas anfífilas formam bicamadas preenchidas por solvente.



## 2.2 Densidade de energia elástica dos cristais líquidos nemáticos

Considerando o parâmetro de ordem escalar como sendo espacialmente constante, obtém-se uma expressão para a densidade de energia elástica de um cristal líquido nemático em termos da primeira derivada espacial do diretor, ou, mais precisamente, em termos da quantidade  $n_{i,j}$ .

Se o diretor for independente da posição, o meio não é distorcido e a densidade de energia elástica pode ser tomada como mínima e indicada por  $f_0$ . Se considerarmos agora o diretor como  $\vec{n}(\vec{r})$  o meio é distorcido e, então, surge uma densidade de energia elástica indicada por  $f$ . Neste caso,  $n_{i,j} \neq 0$ . Na abordagem que consideraremos, admite-se que a primeira derivada espacial de  $\vec{n}(\vec{r})$  seja suficiente para descrever o estado distorcido. Então, é suficiente considerar que

$$f = f(n_{i,j}). \quad (2.2)$$

Se, como suporemos, a primeira derivada de  $\vec{n}$  for uma quantidade pequena, será possível expandir  $f$  em séries de potência de  $n_{i,j}$ , como apontado anteriormente. Essa expansão pode ser desenvolvida apenas até a segunda ordem porque os termos de ordem superior não apresentam uma contribuição relevante. A Eq. (2.2) pode ser escrita como

$$f(n_{i,j}) = f_0 + \left( \frac{\partial f}{\partial n_{i,j}} \right)_0 n_{i,j} + \frac{1}{2} \left( \frac{\partial^2 f}{\partial n_{i,j} \partial n_{k,l}} \right)_0 n_{i,j} n_{k,l} + \dots \quad (2.3)$$

onde a convenção de soma (onde índices repetidos são somados) foi adotada e será utilizada doravante, e o subscrito zero indica que as derivadas são calculadas com respeito ao estado não distorcido. A Eq. (2.3) pode ser reescrita na forma mais compacta

$$f = f_0 + L_{ij} n_{i,j} + \frac{1}{2} K_{ijkl} n_{i,j} n_{k,l} = f_0 + f_1 + f_2 \geq f_0, \quad (2.4)$$

e os tensores elásticos  $L_{ij}$  e  $K_{ijkl} = K_{klij}$  são definidos por

$$L_{ij} = \left( \frac{\partial f}{\partial n_{i,j}} \right)_0 \quad \text{e} \quad K_{ijkl} = \left( \frac{\partial^2 f}{\partial n_{i,j} \partial n_{k,l}} \right)_0. \quad (2.5)$$

Os tensores elásticos  $L_{ij}$  e  $K_{ijkl}$  podem ser decompostos levando-se em consideração os elementos de simetria do meio, como apontado acima. Esses elementos são as componentes de  $\vec{n}$ , a delta de Kronecker,  $\delta_{ij}$ , e o tensor anti-simétrico de Levi-Civita,  $\epsilon_{ijk}$ . Desse modo,  $L_{ij}$  pode ser reescrito na forma

$$L_{ij} = L_1 n_i n_j + L_2 \delta_{ij} + L_3 n_k \epsilon_{kij}, \quad (2.6)$$

onde  $L_i$ ,  $i = 1, 2, 3$  são constantes desconhecidas. Como num meio nemático as direções  $\vec{n}$  e  $-\vec{n}$  são equivalentes, a Eq. (2.4) deve mostrar-se invariante frente a essa operação de troca do sinal de  $\vec{n}$ . Portanto,  $L_1 = 0$  e  $L_2 = 0$ . Em decorrência dessa simetria, a Eq. (2.6) reduz-se a

$$L_{ij} n_{i,j} = L_3 n_k \epsilon_{kij} n_{i,j}. \quad (2.7)$$

Ocorre, porém, que não é muito difícil verificar que

$$n_k \epsilon_{k,i,j} n_{i,j} = n_k \epsilon_{k,i,j} \vec{\nabla}_i n_j = -n_k (\vec{\nabla} \times \vec{n})_k = -\vec{n} \cdot (\vec{\nabla} \times \vec{n}),$$

de modo que o termo  $f_1$  - que comparece em (2.4) -, suprimindo-se o índice 3 de  $L$ , torna-se

$$L_{ij} n_{i,j} = L n_k \epsilon_{k,i,j} n_{i,j} = -L [\vec{n} \cdot (\vec{\nabla} \times \vec{n})]. \quad (2.8)$$

O coeficiente  $L$  só é diferente de zero para o cristal líquido colestérico, porque, nessa fase, há uma deformação espontânea no estado fundamental, isto é,  $L \neq 0$ .

O tensor  $K_{ijkl}$ , por sua vez, pode ser decomposto como segue.

$$\begin{aligned} K_{ijkl} = & K_1 n_i n_j n_k n_l + \frac{1}{2} K_2 (n_i n_l \delta_{kl} + n_k n_l \delta_{ij}) + K_3 n_i n_k \delta_{jl} + \\ & \frac{1}{2} K_4 (n_i n_j \delta_{jk} + n_j n_k \delta_{il}) + K_5 n_j n_l \delta_{ik} + \\ & K_6 \delta_{ij} \delta_{kl} + K_7 \delta_{ik} \delta_{jl} + K_8 \delta_{il} \delta_{jk}. \end{aligned}$$

Em princípio, o tensor  $K_{ijkl}$  possui 8 termos. Assim, o termo  $f_2$  (v. Eq. (2.4)) pode ser escrito como

$$\begin{aligned} \frac{1}{2}K_{ijkl}n_{i,j}n_{k,l} &= \frac{1}{2}[K_1n_in_jn_kn_l + \frac{1}{2}K_2(n_in_j\delta_{kl} + n_kn_l\delta_{ij}) + \\ &K_3n_in_k\delta_{jl} + \frac{1}{2}K_4(n_in_l\delta_{lk} + n_jn_k\delta_{il}) + \\ &K_5n_jn_l\delta_{ik} + K_6\delta_{ij}\delta_{kl} + K_7\delta_{ik}\delta_{jl} + K_8\delta_{il}\delta_{jk}]n_{i,j}n_{k,l}. \end{aligned}$$

Entretanto, sendo  $\vec{n}$  um vetor unitário,  $n_in_i = 1$ . Desse modo, é conveniente recordar que

$$n_in_{i,j} = n_i \frac{\partial n_i}{\partial x_j} = \frac{1}{2} \frac{\partial n_in_i}{\partial x_j} = 0.$$

Diante disso, concluímos que os termos cujos coeficientes constantes são  $K_1$ ,  $K_2$ ,  $K_3$  e  $K_4$  não contribuem para  $f$ . Poremos, portanto,  $K_i = 0$ , para  $i = 1, 2, 3, 4$ . Além disso, alguns cálculos simples, mas bastante trabalhosos, mostram que[22]

$$\begin{aligned} K_5n_jn_l\delta_{ik}n_{i,j}n_{k,l} &= K_5[\vec{n} \times (\vec{\nabla} \times \vec{n})]^2, \\ K_6\delta_{ij}\delta_{kl}n_{i,j}n_{k,l} &= K_6(\vec{\nabla} \cdot \vec{n})^2, \\ K_7\delta_{ik}\delta_{jl}n_{i,j}n_{k,l} &= K_7n_{k,j}n_{k,j}, \\ K_8\delta_{il}\delta_{jk}n_{i,j}n_{k,l} &= K_8n_{l,j}n_{j,l}. \end{aligned}$$

Assim, o termo  $f_2$  adquire a forma

$$f_2 = \frac{1}{2}K_5[\vec{n} \times (\vec{\nabla} \times \vec{n})]^2 + \frac{1}{2}K_6(\vec{\nabla} \cdot \vec{n})^2 + \frac{1}{2}K_7n_{k,j}n_{k,j} + \frac{1}{2}K_8n_{l,j}n_{j,l}. \quad (2.9)$$

Uma simplificação ulterior importante pode ser obtida se se leva em conta que

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

e que

$$n_{k,j}n_{j,k} = (\vec{\nabla} \cdot \vec{n})^2 - \vec{\nabla} \cdot [\vec{n} \cdot (\vec{\nabla} \cdot \vec{n}) + \vec{n} \times (\vec{\nabla} \times \vec{n})]. \quad (2.10)$$

Substituindo-se esses resultados em (2.9) obtém-se

$$\begin{aligned} f_2 = & \frac{1}{2}K_5[\vec{n} \times (\vec{\nabla} \times \vec{n})]^2 + \frac{1}{2}K_6(\vec{\nabla} \cdot \vec{n})^2 + \frac{1}{2}K_7\{(\vec{\nabla} \cdot \vec{n})^2 - \\ & \vec{\nabla} \cdot [\vec{n} \cdot (\vec{\nabla} \cdot \vec{n}) + \vec{n} \times (\vec{\nabla} \times \vec{n})] + [\vec{n} \cdot (\vec{\nabla} \times \vec{n})]^2 + \\ & [\vec{n} \times (\vec{\nabla} \times \vec{n})]^2\} + \frac{1}{2}K_8\{(\vec{\nabla} \cdot \vec{n})^2 - \vec{\nabla} \cdot [\vec{n} \cdot (\vec{\nabla} \cdot \vec{n}) + \vec{n} \times (\vec{\nabla} \times \vec{n})]\}, \end{aligned}$$

ou seja

$$\begin{aligned} f_2 = & \frac{1}{2}(K_6 + K_7 + K_8)(\vec{\nabla} \cdot \vec{n})^2 + \frac{1}{2}K_7[\vec{n} \cdot (\vec{\nabla} \times \vec{n})]^2 + \\ & \frac{1}{2}(K_5 + K_7)[\vec{n} \times (\vec{\nabla} \times \vec{n})]^2 - \\ & (K_7 + K_8)\vec{\nabla} \cdot [\vec{n} \cdot (\vec{\nabla} \cdot \vec{n}) + \vec{n} \times (\vec{\nabla} \times \vec{n})]. \end{aligned} \quad (2.11)$$

Podemos, agora, redefinir as constantes  $K_i \neq 0$  de modo tal que

$$K_6 + K_7 + K_8 = K_{11}, \quad K_7 = K_{22}, \quad K_5 + K_7 = K_{33}, \quad K_8 = K_{24},$$

e a Eq. (2.11) adquirirá a forma

$$\begin{aligned} f_{\text{Frank}} = & \frac{1}{2}K_{11}(\vec{\nabla} \cdot \vec{n})^2 + \frac{1}{2}K_{22}[\vec{n} \cdot (\vec{\nabla} \times \vec{n})]^2 + \frac{1}{2}K_{33}[\vec{n} \times (\vec{\nabla} \times \vec{n})]^2 - \\ & (K_{22} + K_{24})\vec{\nabla} \cdot [\vec{n} \cdot (\vec{\nabla} \cdot \vec{n}) + \vec{n} \times (\vec{\nabla} \times \vec{n})]. \end{aligned} \quad (2.12)$$

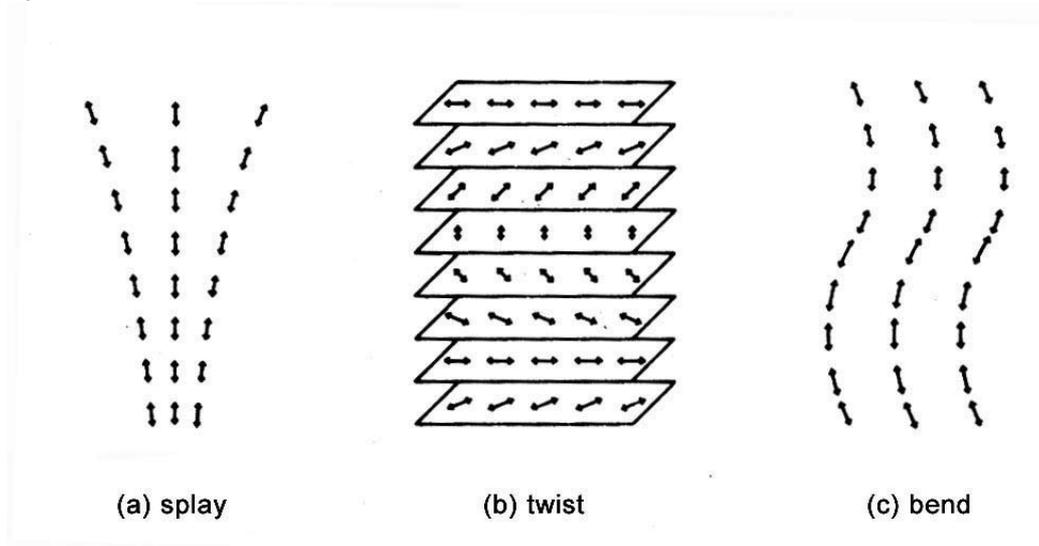
A Eq. (2.12) é a expressão de Frank para a densidade de energia elástica de um cristal líquido nemático deformado[24]. Os novos coeficientes  $K_{11}$ ,  $K_{22}$ ,  $K_{33}$  e  $(K_{22} + K_{24})$  são conhecidos, respectivamente, como constantes elásticas das distorções ‘splay’, ‘twist’, ‘bend’ e ‘saddle-splay’. Essas constantes são o análogo das constantes elásticas de Hooke para meios anisotrópicos, são

positivas, têm a dimensão de energia/comprimento e são dependentes da temperatura[1].

Esta análise mostra que, considerando apenas a aproximação em primeira ordem nas deformações, a densidade de energia elástica do estado distorcido apresenta apenas três contribuições independentes [24] que são:

$$(1) [\vec{\nabla} \cdot \vec{n}]^2, \quad (2) [\vec{n} \cdot \vec{\nabla} \times \vec{n}]^2, \quad \text{e} \quad (3) [\vec{n} \times \vec{\nabla} \times \vec{n}]^2.$$

O primeiro termo é chamado “splay” (divergência), o segundo termo “twist” (torção) e o terceiro termo “bend” (flexão). A Fig. (2.3) mostra as distorções físicas do diretor associadas a cada termo.



O último termo da Eq. (2.12), conforme o teorema de Gauss, oferece apenas uma contribuição de superfície. Então, a densidade de energia elástica relativa ao volume da amostra é proporcional ao quadrado das derivadas espaciais do diretor e depende apenas das três constantes elásticas  $K_{11}$ ,  $K_{22}$  e  $K_{33}$ .

Assim, a densidade de energia elástica relevante ao volume de uma amostra de cristal líquido na fase nemática tem a forma

$$f = f_0 - L[\vec{n} \cdot (\vec{\nabla} \times \vec{n})] + \frac{1}{2}K_{11}(\vec{\nabla} \cdot \vec{n})^2 + \frac{1}{2}K_{22}[\vec{n} \cdot (\vec{\nabla} \times \vec{n})]^2 + \frac{1}{2}K_{33}[\vec{n} \times (\vec{\nabla} \times \vec{n})]^2. \quad (2.13)$$

Por fim, recordamos, mais uma vez, que se  $L \neq 0$  a amostra está no estado distorcido, que é conhecido como a fase colestérica. Neste trabalho consideraremos sempre que  $L = 0$ , de modo que a nossa descrição estará centrada nas propriedades elásticas da fase nemática.

### 2.3 Deformações elásticas: splay, twist, bend

Como já foi dito, os cristais líquidos são caracterizados por uma ordem orientacional das moléculas, e nos nemáticos essa ordem é uniaxial (simetria cilíndrica); o eixo de simetria é paralelo ao diretor  $\vec{n}(\vec{r})$ .

O ponto de partida para o desenvolvimento da Teoria do Contínuo é a consideração do estado de equilíbrio. Em cristais líquidos nemáticos, o alinhamento paralelo de todos os eixos longos das moléculas de uma amostra representa o estado de equilíbrio, ou seja, o estado de energia livre mínima. Porém, quando se perturba o sistema, aplicando-se um campo externo ou introduzindo-se uma flutuação térmica, por exemplo, o diretor local (em algum(ns) ponto(s) da amostra) pode não ser espacialmente invariante. A formulação quantitativa dessa afirmação está no fato de que as quantidades

$$n_{\alpha,\beta} = \partial n_\alpha / \partial x_\beta,$$

onde  $x$  é a variável espacial e os subscritos  $\alpha, \beta = 1, 2, 3$  representam as componentes dos eixos ortogonais do sistema de coordenadas cartesianas, são zero para o estado de equilíbrio e diferentes de zero para alguns, ou todos, os valores de  $\alpha$  e  $\beta$ , onde o sistema é distorcido.

Como o estado distorcido representa um estado de energia livre elástica maior que o estado de equilíbrio, podemos introduzir uma densidade de energia livre para o estado distorcido na forma

$$f = f_0 + \Delta f,$$

onde  $f$  e  $f_0$  representam as densidades de energia livre dos estados distorcido e de equilíbrio, respectivamente, e  $\Delta f$  é uma função de  $n_\alpha$  e  $n_{\alpha,\beta}$  que se anula quando  $n_{\alpha,\beta} = 0$ , para quaisquer

$\alpha$  e  $\beta$ .

Como, em geral,  $|\Delta f|$  é uma quantidade muito pequena em fenômenos de interesse, ela pode ser desenvolvida em séries de potência em  $n_{\alpha,\beta}$ , como é usualmente feito em teoria da elasticidade[23].

## 2.4 Problema variacional

Como já foi visto, a energia elástica total de uma amostra de nemático é obtida pela integração da densidade de energia elástica em todo o volume da amostra, mais as contribuições das energias das superfícies. Assim, num *slab* de espessura  $d$ , a energia total por unidade de área é dada por

$$F = \int_{-d/2}^{d/2} f(\phi, \phi'; z) dz + \gamma_1(\phi_1) + \gamma_2(\phi_2), \quad (2.14)$$

onde  $\phi$  é ângulo de *tilt* que caracteriza a deformação e  $\phi' = d\phi/dz$ . Além disso  $\gamma_1(\phi_1)$  e  $\gamma_2(\phi_2)$  são as contribuições da superfície à energia do sistema. Note-se que  $\phi_1 = \phi(-d/2)$  e  $\phi_2 = \phi(d/2)$ .

Como podemos perceber  $F$  é uma quantidade que depende de  $\phi(z)$ , isto é, trata-se de um funcional. De acordo com os princípios gerais da teoria contínua, o estado estável (i.e., o estado de equilíbrio) é obtido por meio da minimização de  $F[\phi(z)]$ , dada pela Eq. (2.14). Há duas situações fundamentais que devem ser consideradas separadamente.

### 2.4.1 Ancoramento forte

Na situação de ancoramento forte,  $\phi(z)$  assume valores fixos nas superfícies, i.e,

$$\begin{aligned} \phi(z = -d/2) &= \Phi_1 \\ \phi(z = d/2) &= \Phi_2, \end{aligned} \quad (2.15)$$

onde, em princípio  $\Phi_i$  são quantidades conhecidas. A energia elástica por unidade de área é dada por

$$F[\phi(z)] = \int_{-d/2}^{d/2} f[\phi(z), \phi'(z); z] dz. \quad (2.16)$$

Para minimizar esse funcional, buscamos um  $\phi(z)$  ótimo,  $\varphi(z)$ , tal que

$$\frac{\partial f}{\partial \varphi} - \frac{d}{dz} \frac{\partial f}{\partial \varphi'} = 0, \quad \forall z \in \left(-\frac{d}{2}, \frac{d}{2}\right), \quad (2.17)$$

e que satisfaça às condições de contorno explicitadas em (2.15)[22].

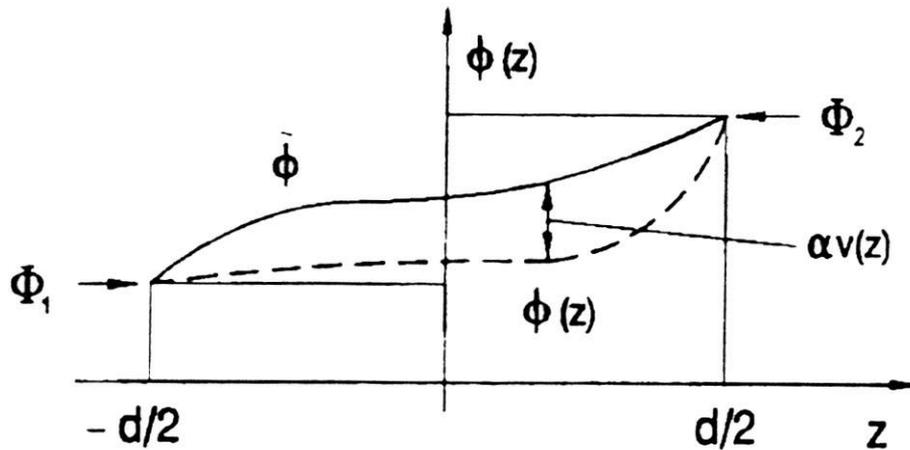


Figura 2-2:  $\tilde{\phi}(z)$  é a função extremizadora do funcional  $F[\phi(z)]$ . No caso de ancoramento forte consideramos  $\phi(\pm d/2) = \phi(\pm d/2)$ , isto é, a função arbitrária  $v(z)$ , se anula para  $z = \pm d/2$ .

#### 2.4.2 Ancoramento fraco

Se os valores de  $\phi(z)$  não estiverem fixos nas superfícies, aparece também uma energia nas superfícies, que representamos por  $\gamma_1(\phi_1)$  e  $\gamma_2(\phi_2)$ . Então, devemos considerar a energia elástica total, por unidade de área, dada pela equação (2.14)

$$F = \int_{-\frac{d}{2}}^{\frac{d}{2}} f(\phi, \phi', z) dz + \gamma_1(\phi_1) + \gamma_2(\phi_2). \quad (2.18)$$

O problema agora é o de determinar uma função  $\phi(z)$ , ótima,  $\varphi(z)$  que minimize (2.18) e obedeça a condições de contorno apropriadas.

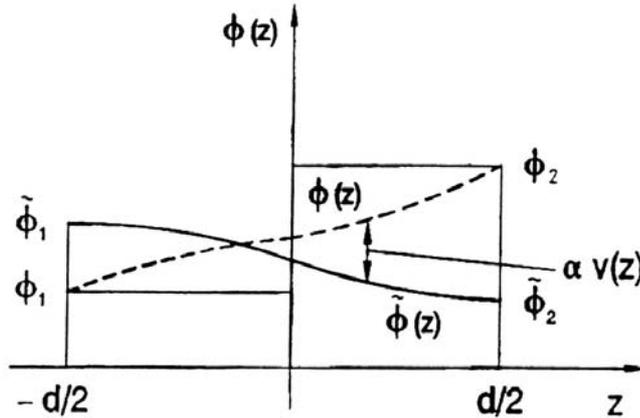


Figura 2-3:  $\tilde{\phi}(z)$  extremizando o funcional  $F[\phi(z)]$ . Em ancoramento fraco os valores da função extremizadora não são fixos nos extremos então;  $\phi(\pm d/2) \neq \tilde{\phi}(\pm d/2)$ , e a função arbitrária  $v(z)$ , não se anula em  $z = \pm d/2$ .

É relativamente imediato mostrar[22] que  $\varphi(z)$  obedece à Equação de Euler-Lagrange (2.17), mas devendo satisfazer às seguintes condições de contorno

$$-\frac{\partial f}{\partial \varphi'(z)} + \frac{d\gamma_1}{d\phi_1} = 0 \quad \text{e} \quad \frac{\partial f}{\partial \varphi'(z)} + \frac{d\gamma_2}{d\phi_2} = 0, \quad (2.19)$$

para  $z = -d/2$  e  $z = d/2$ , respectivamente.

Concluimos assim, o formalismo que será usado na determinação do perfil do diretor, em algumas aplicações que serão apresentadas nos próximos capítulos.

## Capítulo 3

# PERFIL DO DIRETOR PARA DEFORMAÇÕES NO PLANO

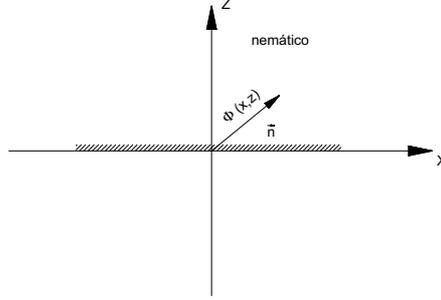
Neste capítulo vamos determinar, de maneira exata, o perfil do diretor em duas dimensões para o caso de uma amostra nemática semi-infinita nas situações de ancoramento forte e fraco, e para o caso de uma amostra de espessura finita,  $d$ , também para as situações de ancoramento forte e fraco. O objetivo da análise é o de estabelecer as equações gerais que governam o comportamento do diretor nesse tipo de geometria e mostrar que o problema matemático geral pode ser resolvido formalmente em termos de propagadores.

### 3.1 O meio semi-infinito

Consideremos uma amostra de cristal líquido nemático, infinita na direção  $x$  e semi-infinita na direção  $z$ , com a superfície, em  $z = 0$ , tratada de modo a favorecer uma certa direção fácil, caracterizada por um ângulo conhecido, ou, no caso mais geral, por uma distribuição dada para esses ângulos, como mostra a Figura (3.1).

As componentes do diretor são

$$n_x = \text{sen } \phi(x, z), \quad n_y = 0, \quad n_z = \text{cos } \phi(x, z). \quad (3.1)$$



A densidade de energia elástica de Frank, definida em (2.13) (recordando que estamos considerando  $L = 0$ ), e que aqui reescrevemos por comodidade, é

$$f = \frac{1}{2}K_{11}(\vec{\nabla} \cdot \vec{n})^2 + \frac{1}{2}K_{22}(\vec{n} \cdot \vec{\nabla} \times \vec{n})^2 + \frac{1}{2}K_{33}(\vec{n} \times \vec{\nabla} \times \vec{n})^2. \quad (3.2)$$

É fácil verificar que, nessas circunstâncias,

$$n \cdot \vec{\nabla} \times \vec{n} = 0. \quad (3.3)$$

Esse resultado indica que ocorre uma distorção do tipo *splay-bend*, já que o termo de *twist* está ausente.

Usando as componentes introduzidas em (3.1) pode-se ainda mostrar que

$$\begin{aligned} f = & \frac{1}{2}K_{11}[\cos^2 \phi(x, z)\left(\frac{\partial \phi}{\partial x}\right)^2 - 2 \sin \phi(x, z) \cos \phi(x, z)\frac{\partial \phi}{\partial x} \frac{\partial \phi}{\partial z} + \\ & \sin^2 \phi(x, z)\left(\frac{\partial \phi}{\partial z}\right)^2] + \frac{1}{2}K_{33}[\sin^2 \phi(x, z)\left(\frac{\partial \phi}{\partial x}\right)^2 + \\ & 2 \sin \phi(x, z) \cos \phi(x, z)\frac{\partial \phi}{\partial x} \frac{\partial \phi}{\partial z} + \cos^2 \phi(x, z)\left(\frac{\partial \phi}{\partial z}\right)^2]. \end{aligned}$$

Na aproximação de uma única constante elástica, isto é, fazendo  $K_{11} = K_{33} = K$ , a expressão

anterior assume a forma simplificada

$$f = \frac{1}{2}K\left[\left(\frac{\partial\phi}{\partial x}\right)^2 + \left(\frac{\partial\phi}{\partial z}\right)^2\right] = \frac{1}{2}K\left(\vec{\nabla}\phi\right)^2. \quad (3.4)$$

A expressão (3.4) é a densidade de energia elástica que usaremos ao longo deste trabalho. Embora obtida depois de importantes aproximações, ela é de grande utilidade na descrição de uma classe de problemas que apresentam não somente interesse teórico ou acadêmico, mas também relevância experimental.

Na situação de ancoramento fraco as moléculas não se encontram rigidamente fixadas nas paredes. Há uma energia de superfície finita e o estado de equilíbrio do diretor será determinado a partir da minimização de uma energia total que leva em conta a contribuição de volume e essa contribuição na superfície. Não se conhece precisamente como é a energia de superfície de uma amostra de cristal líquido. Há uma literatura abundante a respeito e pode-se afirmar que o estabelecimento de resultados precisos acerca dessa quantidade é uma das questões mais debatidas nos últimos anos pela comunidade da área[5]. Contudo, mesmo não havendo uma forma estabelecida a partir de princípios primeiros, há formas fenomenológicas bem aceitas e que podem apresentar predições em bom acordo com resultados experimentais. O protótipo dessas formas para a energia de superfície é aquele proposto por Rapini e Papoular[25]

$$\gamma = -\frac{1}{2}W(\vec{n} \cdot \vec{\pi})^2,$$

onde  $W$  é a energia de ancoramento e  $\vec{\pi}$  é o vetor que define a direção fácil. Desse modo, entende-se que a direção fácil é aquela que minimiza a energia de superfície na ausência de campos externos e distorções no volume. Para o tipo de geometria que estamos considerando é possível escrever a energia de superfície na forma

$$\gamma = \frac{1}{2}W\text{sen}^2(\phi - \Theta), \quad (3.5)$$

onde  $\Theta$  é o ângulo que caracteriza a direção fácil e  $\phi$  é o ângulo de *tilt* na superfície. Uma ulterior aproximação que se faz, e que utilizaremos neste trabalho, é a de considerar situações nas quais o ângulo de *tilt*, no equilíbrio, pouco difere do ângulo estabelecido pela direção fácil. Trata-se da aproximação parabólica, isto é,

$$\gamma \approx \frac{1}{2}W(\phi - \Theta)^2. \quad (3.6)$$

A energia elástica total da amostra nemática pode ser obtida integrando-se a densidade de energia elástica (3.4) em todo o volume da amostra, e levando-se em conta a contribuição de superfície. Nos caso de uma amostra semi-infinita, a energia elástica total, por unidade de comprimento ao longo de  $y$ , é dada por

$$F = \int_{-\infty}^{\infty} dx \int_0^{\infty} dz \frac{1}{2}K[(\frac{\partial\phi}{\partial x})^2 + (\frac{\partial\phi}{\partial z})^2] + \int_{-\infty}^{\infty} (\frac{W}{2})[\phi(x) - \Theta(x)]^2 dx. \quad (3.7)$$

Fazendo uso do cálculo variacional apresentado no capítulo anterior, mas agora estendido ao caso bidimensional, devemos encontrar uma solução  $\phi(x, z)$  que, na região  $0 \leq z < \infty$  e  $-\infty < x < \infty$ , minimize o funcional acima, e satisfaça a condições de contorno apropriadas, que discutiremos em detalhes na seqüência.

Consideremos, inicialmente, o caso de ancoramento forte. Nesse caso, o problema, do ponto de vista matemático, é conhecido como Problema de Dirichlet, pois busca-se uma função harmônica, especificando-se o valor da função no contorno, isto é, deve-se encontrar uma solução para

$$\nabla^2\phi(x, z) = 0, \quad (3.8)$$

que satisfaça a condição

$$\phi(x, 0) = \Theta(x), \quad -\infty < x < \infty. \quad (3.9)$$

onde  $\Theta(x)$ , como salientado anteriormente, representa a orientação imposta pela superfície tratada. A solução procurada pode ser escrita na forma geral[26] como

$$\phi(x, z) = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{z}{z^2 + (x - x')^2} \Theta(x') dx'. \quad (3.10)$$

No caso de ancoramento fraco, a solução procurada deve satisfazer ainda a Eq. (3.8), mas agora deve obedecer à condição

$$-\left(\frac{\partial\phi}{\partial z}\right)_{z=0} + \frac{1}{L}[\phi(x,0) - \Theta(x)] = 0, \quad (3.11)$$

onde  $L = K/W$  é o comprimento de extrapolação[1]. Uma amostra em ancoramento fraco com comprimento de extrapolação  $L$  é equivalente à mesma amostra em situação de ancoramento forte com uma espessura  $d + 2L$ . A solução geral do problema será, portanto,

$$\phi(x, z) = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{z}{z^2 + (x' - x)^2} \phi(x', 0) dx', \quad (3.12)$$

onde, agora,  $\phi(x, 0)$  é o valor de equilíbrio do ângulo de *tilt* na superfície, que é determinado a partir de (3.11). De fato, a condição de contorno (3.11) pode ser posta na forma

$$\phi(x, 0) = \Theta(x) + \frac{L}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\phi(x', 0)}{(x' - x)^2} dx', \quad (3.13)$$

ou, ainda,

$$\phi(x, 0) = \Theta(x) + \frac{L}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{x' - x} \frac{d\phi(x', 0)}{dx'} dx', \quad (3.14)$$

pois  $(x' - x)^{-2} = -d(x' - x)^{-1}/dx'$ . O problema matemático é agora o problema misto de Neumann-Dirichlet: busca-se uma função harmônica quando uma relação entre essa função e sua derivada normal é conhecida sobre o contorno[27]. No caso de ancoramento fraco, o valor de equilíbrio para o ângulo de *tilt* na superfície é dado em termos de uma equação integral[18].

### 3.2 Amostra de espessura $d$

Consideraremos agora uma amostra infinita na direção  $x$  e de espessura  $d$  na direção  $z$ , de modo tal que as superfícies tratadas estejam localizadas em  $z = \pm d/2$ , como mostra a Fig.(3.2).

No caso do *ancoramento forte*, a energia elástica, por unidade de comprimento na direção  $y$ , é:

$$F = \int_{-\infty}^{\infty} dx \int_{-d/2}^{d/2} dz f = \frac{1}{2} K \int_{-\infty}^{\infty} dx \int_{-d/2}^{d/2} [(\frac{\partial\phi}{\partial x})^2 + (\frac{\partial\phi}{\partial z})^2] dz, \quad (3.15)$$

que, minimizada, nos leva novamente à equação de Laplace cuja solução harmônica deve satis-

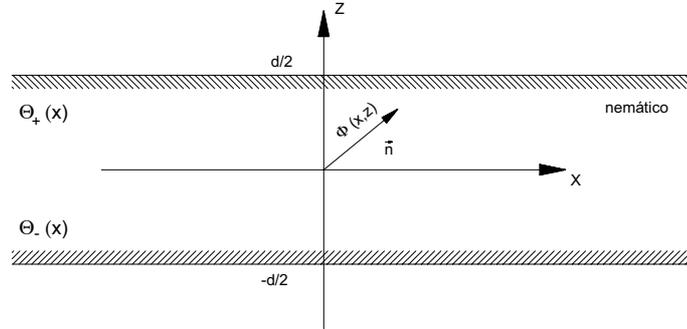


Figura 3-1: Amostra de espessura  $d$ .

fazer as seguintes condições de contorno

$$\phi(x, -\frac{d}{2}) = \Theta_-(x), \quad \phi(x, \frac{d}{2}) = \Theta_+(x). \quad (3.16)$$

A solução geral pode ser buscada a partir da transformada de Fourier

$$\phi(x, z) = \int_{-\infty}^{\infty} h(z, k) e^{ikx} dk, \quad (3.17)$$

de modo que a equação de Laplace se torna

$$\nabla^2 \phi = \int_{-\infty}^{\infty} [-k^2 h(z, k) + \frac{\partial^2 h(z, k)}{\partial z^2}] e^{ikx} dk = 0. \quad (3.18)$$

Devemos, então, considerar a equação de Helmholtz

$$-k^2 h(z, k) + \frac{\partial^2 h(z, k)}{\partial z^2} = 0. \quad (3.19)$$

Não é difícil verificar que a solução pode ser escrita na forma

$$h(z, k) = \alpha(k)e^{kz} + \beta(k)e^{-kz}, \quad (3.20)$$

onde  $\alpha(k)$  e  $\beta(k)$  deverão ser determinados a partir do uso das condições de contorno. A solução geral (3.17) será reescrita como

$$\phi(x, z) = \int_{-\infty}^{\infty} [\alpha(k)e^{ikx+kz} + \beta(k)e^{ikx-kz}] dk. \quad (3.21)$$

Usando as condições de contorno, obtemos:

$$\begin{aligned} \phi(x, \frac{d}{2}) &= \Theta_+(x) = \int_{-\infty}^{\infty} [\alpha(k)e^{ikx+kd/2} + \beta(k)e^{ikx-kd/2}] dk, \\ \phi(x, -\frac{d}{2}) &= \Theta_-(x) = \int_{-\infty}^{\infty} [\alpha(k)e^{ikx-kd/2} + \beta(k)e^{ikx+kd/2}] dk. \end{aligned} \quad (3.22)$$

Usando, mais uma vez, a Transformada de Fourier, o conjunto de equações (3.22) se pode escrever na forma compacta

$$\begin{aligned} I_+(k) &= \int_{-\infty}^{\infty} e^{-ikx} \Theta_+(x) dx = 2\pi[\alpha(k)e^{kd/2} + \beta(k)e^{-kd/2}] \\ I_-(k) &= \int_{-\infty}^{\infty} e^{ikx} \Theta_-(x) dx = 2\pi[[\alpha(k)e^{-kd/2} + \beta(k)e^{kd/2}]. \end{aligned} \quad (3.23)$$

Portanto, chegamos a um sistema de duas equações que, resolvido, fornece

$$\begin{aligned} \alpha(k) &= \frac{I_+e^{kd/2} - I_-e^{-kd/2}}{2 \sinh(kd)}, \\ \beta(k) &= \frac{I_-e^{kd/2} - I_+e^{-kd/2}}{2 \sinh(kd)}. \end{aligned} \quad (3.24)$$

Assim

$$\phi(x, z) = \int_{-\infty}^{\infty} \left[ \frac{I_+e^{kd/2} - I_-e^{-kd/2}}{2 \sinh(kd)} e^{ikx+kz} + \frac{I_-e^{kd/2} - I_+e^{-kd/2}}{2 \sinh(kd)} e^{ikx-kz} \right] dk.$$

Fazendo uso das Eqs. (3.23) teremos

$$\phi(x, z) = \int_{-\infty}^{\infty} [G_+(x - x', z)\Theta_+(x') + G_-(x - x', z)\Theta_-(x')]dx' \quad (3.25)$$

onde introduzimos as quantidades

$$G_{\pm}(x - x', z) = \pm \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{ik(x-x')} \frac{\sinh[k(z \pm d/2)]}{\sinh(kd)} dk. \quad (3.26)$$

Embora não elementar, a integração acima pode ser realizada sem maiores dificuldades. De fato, pode-se verificar que os propagadores são obtidos (a menos de uma constante) a partir da Transformada de Fourier (inversa) das funções

$$f_{\pm}(z, k) = \frac{\sinh[k(z \pm d/2)]}{\sinh kd},$$

e são

$$G_{\pm}(x - x', z) = \frac{1}{2d} \frac{\cos\left(\frac{\pi}{d}z\right)}{\cosh\left[\frac{\pi}{d}(x - x')\right] \mp \operatorname{sen}\left(\frac{\pi}{d}z\right)}. \quad (3.27)$$

As Eqs. (3.25) e (3.27) determinam, formalmente, o perfil do diretor em uma amostra nemática em duas dimensões, na aproximação de uma única constante elástica, e, ainda, no caso de ancoramento forte. É importante ressaltar a generalidade deste resultado; o problema de Dirichlet é formalmente resolvido para qualquer distribuição de eixos fáceis, representadas por  $\Theta_{\pm}(x)$ . Do ponto de vista prático, é o tratamento dado à superfície que determina a distribuição das direções fáceis.

Consideremos agora o problema geral na situação de *ancoramento fraco*. Nesse caso, a energia elástica total, por unidade de comprimento ao longo de  $y$ , pode ser escrita na forma geral

$$\begin{aligned} F &= \int_{-\infty}^{\infty} dx \int_{-d/2}^{d/2} dz \frac{1}{2} K \left[ \left( \frac{\partial \phi}{\partial x} \right)^2 + \left( \frac{\partial \phi}{\partial z} \right)^2 \right] \\ &+ \frac{1}{2} W_- \int_{-\infty}^{\infty} [\phi_-(x) - \Theta_-(x)]^2 dx + \frac{1}{2} W_+ \int_{-\infty}^{\infty} [\phi_+(x) - \Theta_+(x)]^2 dx, \end{aligned} \quad (3.28)$$

onde

$$\phi_{\pm}(x) = \phi\left(x, \pm \frac{d}{2}\right) \quad (3.29)$$

são os valores de equilíbrio do ângulo de *tilt* na superfície. Além disso, em (3.28),  $W_-$  e  $W_+$  referem-se, respectivamente, às energias de ancoramento da superfície inferior e superior. Sem perda de generalidade, podemos considerar, doravante, superfícies idênticas, isto é,  $W_- = W_+ = W$ . Numa situação de ancoramento fraco o perfil do diretor pode ser calculado resolvendo-se a Equação de Laplace (3.8), mas agora usando as seguintes condições de contorno[28]

$$\pm L \left[ \frac{\partial \phi(x, z)}{\partial z} \right]_{z=\pm d/2} + \phi_{\pm}(x) - \Theta_{\pm}(x) = 0. \quad (3.30)$$

A solução geral para o caso de ancoramento fraco pode ser posta na forma

$$\phi_W(x, z) = \int_{-\infty}^{\infty} [G_+(x - x', z)\phi_+(x') + G_-(x - x', z)\phi_-(x')] dx', \quad (3.31)$$

mas, agora, em vista das condições de contorno (3.30), os ângulos  $\phi_{\pm}(x)$  serão determinados por

$$\phi_{\pm}(x) = \Theta_{\pm}(x) \mp L \int_{-\infty}^{\infty} \left[ \phi_+(x') \frac{\partial G_+(x - x', z)}{\partial z} + \phi_-(x') \frac{\partial G_-(x - x', z)}{\partial z} \right]_{z=\pm d/2} dx'. \quad (3.32)$$

Dessa forma, o problema misto correspondente ao caso de ancoramento fraco fica formalmente resolvido. Note-se, entretanto, que agora o problema passa pela solução de um sistema de duas equações integrais de Fredholm [18], de segunda espécie, representado pelas equações (3.32).

As equações até aqui estabelecidas formam o ‘arsenal’ matemático necessário para o tratamento do problema elástico em amostras nemáticas onde o perfil do diretor está definido no plano. É claro que o uso da aproximação de uma única constante elástica simplifica consideravelmente o problema. Na verdade, essa aproximação é essencial para a obtenção da Equação de Laplace. O formalismo até aqui apresentado pode ainda ser generalizado de modo a considerar o efeito de um campo externo sobre a orientação molecular ou o efeito de uma energia de ancoramento que dependa da posição[14, 15]. Consideradas as aproximações que fizemos, o modelo apresentado é o mais completo e geral para a determinação *exata* dos perfis do diretor

em uma amostra na presença de distorções do tipo *splay-bend*.

Vamos agora mostrar como é possível afrontar o problema das equações integrais acopladas (3.32) de modo a reduzir a dificuldade na obtenção de uma solução geral do problema. Em (3.32) comparecem as seguintes quantidades

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial G_+}{\partial z}\right)_{z=\frac{d}{2}} &= -\frac{\pi}{4d^2} \operatorname{cosech}^2\left[\frac{\pi(x-x')}{2d}\right] = A(x-x'), \\ \left(\frac{\partial G_-}{\partial z}\right)_{z=\frac{d}{2}} &= -\frac{\pi}{4d^2} \operatorname{sech}^2\left[\frac{\pi(x-x')}{2d}\right] = B(x-x'), \end{aligned} \quad (3.33)$$

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial G_+}{\partial z}\right)_{z=-\frac{d}{2}} &= \frac{\pi}{4d^2} \operatorname{sech}^2\left[\frac{\pi(x-x')}{2d}\right] = -B(x-x'), \\ \left(\frac{\partial G_-}{\partial z}\right)_{z=-\frac{d}{2}} &= \frac{\pi}{4d^2} \operatorname{cosech}^2\left[\frac{\pi(x-x')}{2d}\right] = -A(x-x'). \end{aligned} \quad (3.34)$$

Desse modo, as Eqs. (3.32) podem ser escritas na forma

$$\begin{aligned} \phi_+(x) &= \Theta_+(x) - L \int_{-\infty}^{\infty} [\phi_+(x')A(x-x') + \phi_-(x')(B(x-x'))]dx', \\ \phi_-(x) &= \Theta_-(x) + L \int_{-\infty}^{\infty} [-\phi_+(x')B(x-x') - \phi_-(x')A(x-x')]dx'. \end{aligned} \quad (3.35)$$

Fazendo uso do teorema da convolução[18] podemos reescrever o sistema acima na forma:

$$\begin{aligned} \tilde{\phi}_+(w) &= \tilde{F}_1(w) - L\sqrt{2\pi}\tilde{\phi}_+(w)\tilde{A}(w) - L\sqrt{2\pi}\tilde{\phi}_-(w)\tilde{B}(w), \\ \tilde{\phi}_-(w) &= \tilde{F}_2(w) - L\sqrt{2\pi}\tilde{\phi}_+(w)\tilde{B}(w) - L\sqrt{2\pi}\tilde{\phi}_-(w)\tilde{A}(w), \end{aligned} \quad (3.36)$$

onde as quantidades  $\tilde{\phi}_+(w)$ ,  $\tilde{F}_1(w)$ ,  $\tilde{A}(w)$ ,  $\tilde{\phi}_-(w)$  e  $\tilde{B}(w)$ , são as transformadas de Fourier das quantidades  $\phi_+(x)$ ,  $\Theta_+(x)$ ,  $A(x-x')$ ,  $\phi_-(x')$  e  $B(x-x')$ , respectivamente. Ficamos assim com um sistema de equações que pode ser facilmente resolvido para fornecer

$$\tilde{\phi}_+(w) = \frac{\tilde{F}_1(w)[1 + L\tilde{A}(w)\sqrt{2\pi}] - \tilde{F}_2(w)L\sqrt{2\pi}\tilde{B}(w)}{1 + 2\sqrt{2\pi}LA + 2\pi L^2[\tilde{A}(w)^2 - \tilde{B}(w)^2]} \quad (3.37)$$

$$\tilde{\phi}_-(w) = \frac{F_2(w)[1 + L\sqrt{2\pi}\tilde{A}(w)] - \tilde{F}_1(w)L\tilde{B}(w)\sqrt{2\pi}}{1 + 2\sqrt{2\pi}LA + 2\pi L^2[\tilde{A}(w)^2 - \tilde{B}(w)^2]}. \quad (3.38)$$

Agora é, então, possível inverter o problema para se obter uma solução geral, pois as equações foram desacopladas; especificamente, devemos calcular

$$\phi_{\pm}(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{\phi}_{\pm}(w)e^{iwx}dw, \quad (3.39)$$

fazendo uso das Eqs. (3.37). É claro que uma tarefa dessa natureza não é, de modo geral, simples. Contudo, é perfeitamente possível estabelecerem-se resultados gerais a partir da análise dos pontos singulares dos integrandos em (3.39). Em outras palavras, uma análise matemática mais rigorosa e completa pode ser desenvolvida, de modo a permitir conclusões as mais gerais possíveis para uma classe de problemas relevantes. No próximo capítulo aplicaremos o formalismo estabelecido até aqui para o tratamento de algumas situações de particular interesse.

## Capítulo 4

# APLICAÇÕES: SUPERFÍCIES INOMOGÊNEAS

Neste capítulo fazemos algumas aplicações do formalismo apresentado no capítulo anterior, considerando amostras cujas superfícies apresentam inhomogeneidades. Analisamos, também, como se comporta a energia elástica em cada situação apresentada e resolvemos exatamente o problema de uma distribuição periódica dos eixos fáceis na superfície.

### 4.1 Exemplos: Paredes de Orientação

#### 4.1.1 Direção fácil equivalente

Consideremos inicialmente uma amostra semi-infinita em situação de ancoramento forte, na qual a distribuição das direções fáceis é dada por

$$\Theta(x) = \begin{cases} \Theta_1, & x < 0, \\ \Theta_2, & x > 0. \end{cases} \quad (4.1)$$

Lembrando que a solução para a amostra semi-infinita, dada pela equação (3.10), é:

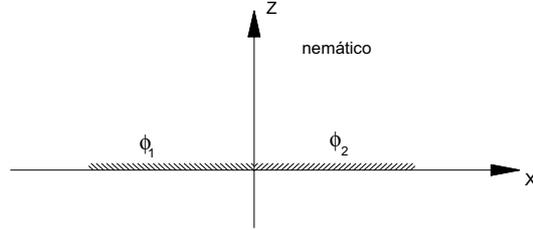


Figura 4-1: Amostra semi-infinita com a superfície tratada com os ângulos  $\Theta_1$  para  $x < 0$  e  $\Theta_2$  para  $x > 0$ .

$$\phi(x, z) = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{z}{z^2 + (x - x')^2} \Theta(x') dx', \quad (4.2)$$

temos

$$\phi(x, z) = \frac{1}{\pi} \left[ \int_{-\infty}^0 \Theta_1 \frac{z}{z^2 + (x - x')^2} dx' + \int_0^{\infty} \Theta_2 \frac{z}{z^2 + (x - x')^2} dx' \right]; \quad (4.3)$$

ou seja

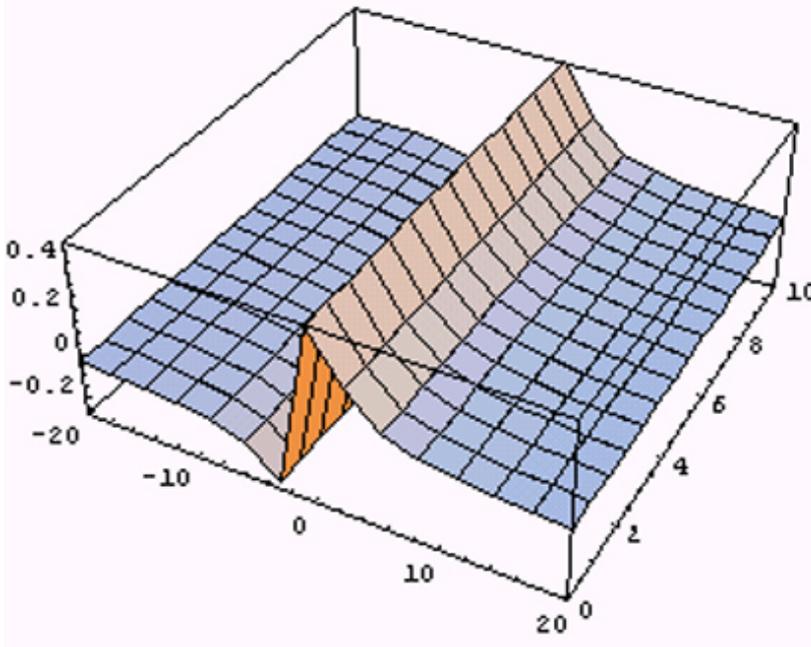
$$\phi(x, z) = \frac{(\Theta_1 + \Theta_2)}{2} + \frac{(\Theta_2 - \Theta_1)}{\pi} \arctan \left[ \frac{x}{z} \right]. \quad (4.4)$$

A densidade de energia elástica, por unidade de comprimento na direção  $y$ , dada pela equação (3.4), fica

$$f = \frac{1}{2} K \frac{(\Theta_1 - \Theta_2)^2}{\pi^2} \frac{1}{x^2 + z^2}. \quad (4.5)$$

O gráfico a seguir é uma ilustração dessa densidade de energia ( $2f/K$ ) para os valores de

$\Theta_1 = \frac{\pi}{2}$ ,  $\Theta_2 = \frac{\pi}{4}$ , numa região compreendida entre  $-20 < x/d < 20$  e  $0 < z/d < 10$ .



Podemos notar que para  $x \rightarrow 0$  e  $z \rightarrow 0$  essa energia diverge, porque nesse ponto há uma disclinação. A orientação molecular na amostra não é uniforme. Notamos o surgimento de uma parede de orientação dividindo duas regiões da amostra com orientações distintas.

Este exemplo simples é de grande utilidade para introduzirmos o conceito de direção fácil uniforme equivalente. Esta definição, no presente caso, nos dá

$$\lim_{z \rightarrow \infty} \phi(x, z) = \frac{1}{2}(\Theta_1 + \Theta_2) = \Theta_e. \quad (4.6)$$

Essa direção, como esperado, é aquela que teria uma amostra uniformemente alinhada que fosse equivalente a uma dada amostra cuja orientação não é uniforme.

#### 4.1.2 Paredes de orientação em amostras de espessura $d$

Consideremos, agora, uma amostra infinita na direção  $x$  e de espessura  $d$  na direção  $z$ . Admitamos que as superfícies que limitam a amostras (localizadas em  $z = \pm d/2$ ) tenham sido tratadas de modo tal que a distribuição de direções fáceis seja dada por

$$\Theta_+(x) = \begin{cases} \Theta_1, & x < 0 \\ \Theta_2, & x > 0 \end{cases} \quad \text{e} \quad \Theta_-(x) = \begin{cases} \Theta_3, & x < 0 \\ \Theta_4, & x > 0. \end{cases} \quad (4.7)$$

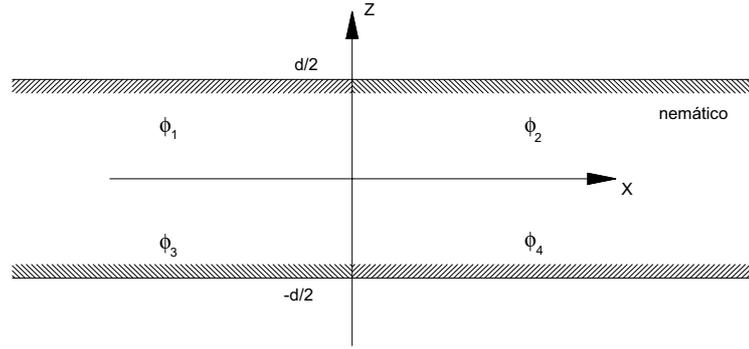


Figura 4-2: Amostra de espessura  $d$  com as superfícies tratadas com os seguintes ângulos: em  $z = d/2$ ,  $\Theta_1$  para  $x < 0$  e  $\Theta_2$  para  $x > 0$  e em  $z = -d/2$ ,  $\Theta_3$  para  $x < 0$  e  $\Theta_4$  para  $x > 0$ .

A solução geral estabelecida no capítulo anterior tem a forma

$$\phi(x, z) = \int_{-\infty}^{\infty} [G_+(x - x', z)\Theta_+(x') + G_-(x - x', z)\Theta_-(x')]dx'. \quad (4.8)$$

Portanto, usando as condições (4.7), temos

$$\begin{aligned} \phi(x, z) = & \Theta_1 \int_{-\infty}^0 G_+(x - x', z)dx' + \Theta_2 \int_0^{\infty} G_+(x - x', z)dx' + \\ & \Theta_3 \int_{-\infty}^0 G_-(x - x', z)dx' + \Theta_4 \int_0^{\infty} G_-(x - x', z)dx', \end{aligned}$$

que resulta em

$$\phi(x, z) = \frac{(\Theta_1 + \Theta_2)}{\pi} t_1 + \frac{(\Theta_2 - \Theta_1)}{\pi} t_2 + \frac{(\Theta_3 + \Theta_4)}{\pi} t_3 + \frac{(\Theta_4 - \Theta_3)}{\pi} t_4, \quad (4.9)$$

onde

$$\begin{aligned} t_1 &= \arctan(\alpha), \\ t_2 &= \arctan \left[ \alpha \tanh \left( \frac{\pi x}{2d} \right) \right], \\ t_3 &= \arctan \left( \frac{1}{\alpha} \right), \\ t_4 &= \arctan \left[ \frac{1}{\alpha} \tanh \left( \frac{\pi x}{2d} \right) \right], \end{aligned}$$

com

$$\alpha = \frac{\cos\left[\frac{\pi z}{2d}\right] + \operatorname{sen}\left[\frac{\pi z}{2d}\right]}{\cos\left[\frac{\pi z}{2d}\right] - \operatorname{sen}\left[\frac{\pi z}{2d}\right]}. \quad (4.10)$$

A densidade de energia elástica é calculada por meio da Eq. (3.4) e resulta em

$$\begin{aligned} f &= \frac{1}{4d^2} K \pi^2 \left[ \left( \frac{-2A \cos\left[\frac{\pi x}{d}\right] \cos\left[\frac{\pi z}{d}\right] + B \operatorname{sen}\left[\frac{2\pi z}{d}\right]}{\cos\left[\frac{2\pi z}{d}\right] + \cosh\left[\frac{2\pi x}{d}\right]} \right) \right]^2 + \\ &\quad \left[ \left( C + \frac{(-2A \operatorname{sen}\left[\frac{\pi z}{d}\right] \operatorname{sen}\left[\frac{\pi x}{d}\right] + B \operatorname{senh}\left[\frac{2\pi x}{d}\right])}{\cos\left[\frac{2\pi z}{d}\right] + \cosh\left[\frac{2\pi x}{d}\right]} \right) \right]^2, \end{aligned} \quad (4.11)$$

onde:

$$\begin{aligned} A &= \Theta_1 - \Theta_2 - \Theta_3 + \Theta_4, \\ B &= -\Theta_1 + \Theta_2 - \Theta_3 + \Theta_4, \\ C &= \Theta_1 + \Theta_2 + \Theta_3 + \Theta_4. \end{aligned}$$

O gráfico a seguir é uma ilustração dessa densidade de energia elástica para os valores  $\Theta_1 = \Theta_4 = \frac{\pi}{2}$ , e  $\Theta_2 = \Theta_3 = \frac{\pi}{4}$ , com  $x$  e  $z$  medidos em unidades da espessura da amostra  $d$ .

Novamente temos um ponto de disclinação na região em que  $x \rightarrow 0$  e  $z \rightarrow 0$ . A densidade de energia é principalmente localizada em torno de  $x = 0$ , apresentando dois pontos divergentes para  $z = \pm d/2$ .

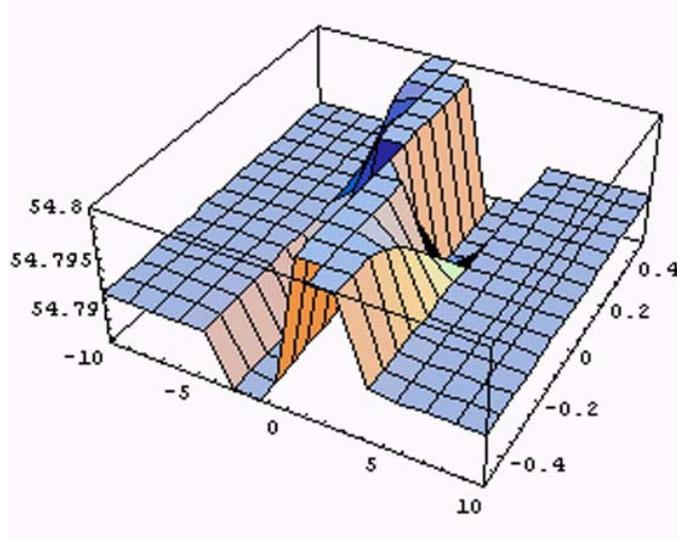


Figura 4-3: Densidade de energia elástica para amostra de espessura  $d$  em ancoramento forte. Novamente há uma divergência no ponto  $(0,0,0)$ .

## 4.2 Distribuição periódica de eixos fáceis

Vamos determinar a orientação molecular em uma amostra nemática de espessura  $d$  (com as superfícies localizadas em  $z = 0$  e  $z = d$ , por comodidade) cujas superfícies tenham sido tratadas de modo tal que apresentem uma distribuição periódica para os eixos fáceis, conforme a Fig. (4.5).

Teremos, portanto, em  $z = 0$

$$\Theta_d(x) = \begin{cases} \Theta_1, & 0 < x < a, \\ \Theta_2, & a < x < \lambda, \end{cases}$$

e em  $z = d$

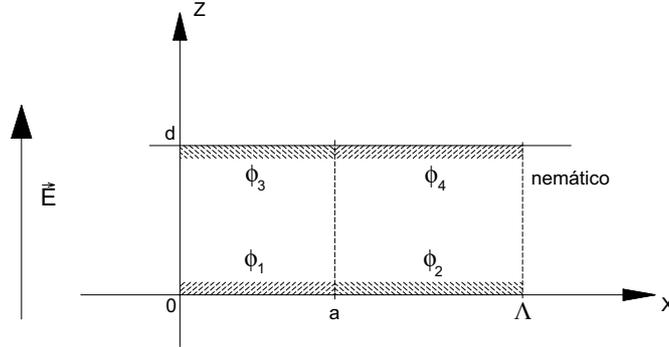


Figura 4-4: Distribuição periódica de eixos fáceis numa amostra de espessura  $d$ .

$$\Theta_0(x) = \begin{cases} \Theta_3, & 0 < x < a, \\ \Theta_4, & a < x < \lambda, \end{cases}$$

onde  $\lambda$  é o período da distribuição. Além disso,  $\Theta_0(x)$  e  $\Theta_d(x)$  referem-se às distribuições dos eixos fáceis nas duas superfícies localizadas, respectivamente, em  $z = 0$  e  $z = d$ .

As componentes do diretor nessa geometria são

$$n_x = \text{sen}\phi(x, z), \quad n_y = 0, \quad n_z = \text{cos}\phi(x, z). \quad (4.12)$$

Desse modo, novamente, a energia total por unidade de comprimento ao longo de  $y$ , relativa a um período  $\lambda$ , pode ser escrita na forma

$$\begin{aligned} F_1 &= F_V + F_S = \int_{-\infty}^{\infty} \int_0^{\lambda} \frac{1}{2} K (\vec{\nabla}\phi)^2 dx dz \\ &+ \frac{1}{2} W \int_0^{\lambda} [\phi(x, 0) - \Theta_0(x)]^2 dx + \frac{1}{2} W \int_0^{\lambda} [\phi(x, d) - \Theta_d(x)]^2 dx, \end{aligned} \quad (4.13)$$

onde consideramos a situação de ancoramento fraco e admitimos o fato de as superfícies serem idênticas no que se refere à energia de ancoramento.

O problema variacional é sempre aquele discutido no Capítulo II. Agora, porém, devemos procurar soluções periódicas para a Equação de Laplace

$$\frac{\partial^2 \phi(x, z)}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \phi(x, z)}{\partial z^2} = 0,$$

satisfazendo às seguintes condições de contorno:

I - Ancoramento forte:

$$\phi(x, 0) = \Theta_0(x) \quad \text{e} \quad \phi(x, d) = \Theta_d(x); \quad (4.14)$$

II - Ancoramento fraco:

$$\begin{aligned} -L \left( \frac{\partial \phi}{\partial z} \right)_{z=0} + \phi(x, 0) &= \Theta_0(x) \\ L \left( \frac{\partial \phi}{\partial z} \right)_{z=d} + \phi(x, d) &= \Theta_d(x). \end{aligned} \quad (4.15)$$

Uma solução pode ser escrita na forma

$$\phi(x, z) = e^{ikx} [A \cosh kz + B \sinh kz]. \quad (4.16)$$

Para que a solução seja periódica, é necessário que:

$$\phi(x + \lambda, z) = \phi(x, z), \quad (4.17)$$

e, portanto,

$$e^{ik\lambda} = 1 \quad \text{e} \quad k_n = \frac{2n\pi}{\lambda}, \text{ para } n = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \pm \dots \quad (4.18)$$

A solução que satisfaz as condições de contorno em consideração tem a forma

$$\phi(x, z) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{ik_n x} [A_n \cosh(k_n z) + B_n \sinh(k_n z)]. \quad (4.19)$$

No caso de ancoramento forte devemos aplicar as condições de contorno (I). Temos

$$\phi(x, 0) = \Phi_0(x) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} A_n e^{ik_n x} \quad (4.20)$$

e

$$\phi(x, d) = \Phi_d(x) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} [A_n \cosh(k_n d) + B_n \sinh(k_n d)] e^{ik_n x}. \quad (4.21)$$

Sabendo que

$$\int_0^\lambda e^{i(k_n - k_m)x} dx = \lambda \delta_{nm}, \quad (4.22)$$

podemos usar as transformadas de Fourier de  $\Phi_0(x)$  e  $\Phi_d(x)$ , denominando-as, respectivamente, de  $I_0(n)$  e  $I_d(n)$ , para escrever

$$I_0(n) = \frac{1}{\lambda} \int_0^\lambda \Phi_0(x) e^{-ik_n x} dx = A_n \quad (4.23)$$

e

$$I_d(n) = \frac{1}{\lambda} \int_0^\lambda \Phi_d(x) e^{-ik_n x} dx = A_n \cosh(k_n d) + B_n \sinh(k_n d). \quad (4.24)$$

Resolvendo o sistema de duas equações acima, encontramos

$$A_n = I_0(n) \quad \text{e} \quad B_n = \frac{I_d(n) - I_0(n) \cosh(k_n d)}{\sinh(k_n d)}. \quad (4.25)$$

Antes de prosseguir, podemos verificar os limites  $z = 0$  e  $z = d$ . Com efeito, obtemos

$$\phi(x, 0) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{ik_n x} I_0(n) \quad (4.26)$$

e

$$\phi(x, d) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{ik_n x} I_d(n), \quad (4.27)$$

o que demonstra que esta solução satisfaz as condições de contorno (I).

Para a situação de ancoramento fraco, nós admitimos que a solução tenha a mesma forma que no caso do ancoramento forte, porém com os coeficientes  $A_n$  e  $B_n$  modificados, respectivamente, para  $\tilde{A}_n$  e  $\tilde{B}_n$ , isto é,

$$\phi(x, z) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{ik_n x} \left[ \tilde{A}_n \cosh(k_n z) + \tilde{B}_n \sinh(k_n z) \right] \quad (4.28)$$

A transformação de  $A_n$  para  $\tilde{A}_n$  e  $B_n$  para  $\tilde{B}_n$ , que garante a solução para o caso de ancoramento fraco é da seguinte forma:

$$\tilde{A}_n = \frac{A_n + Lk_n B_n}{1 - L^2 k_n^2} \quad \text{e} \quad \tilde{B}_n = \frac{B_n + Lk_n A_n}{1 - L^2 k_n^2}. \quad (4.29)$$

Vale a pena sublinhar a generalidade dos resultados que obtivemos até aqui. O problema de Dirichlet (ancoramento forte) e o problema misto (ancoramento fraco) foi resolvido de maneira exata para qualquer distribuição periódica de eixos fáceis na amostra. A única exigência é a existência das transformadas de Fourier que definem  $I_0(n)$  e  $I_d(n)$ . Há uma ampla classe de problemas físicos relevantes para os quais essa exigência pode ser satisfeita sem maiores problemas.

Retornemos agora o caso específico da célula mostrada na Fig (4.5), na situação de ancoramento forte. Naquele caso, temos

$$\begin{aligned} I_0(n) &= \frac{1}{\lambda} \left[ \int_0^a \Theta_1 e^{-ik_n x'} dx' + \int_a^\lambda \Theta_2 e^{-ik_n x'} dx' \right] \\ &= \frac{(\Theta_2 - \Theta_1)(e^{-ik_n a} - 1)}{2in\pi} \end{aligned} \quad (4.30)$$

e

$$\begin{aligned}
I_d(n) &= \frac{1}{\lambda} \left[ \int_0^a \Theta_3 e^{-ik_n x'} dx' + \int_a^\lambda \Theta_4 e^{-ik_n x'} dx' \right] \\
&= \frac{(\Theta_4 - \Theta_3)(e^{-ik_n a} - 1)}{2in\pi}.
\end{aligned} \tag{4.31}$$

Assim, a solução geral adquire a forma

$$\begin{aligned}
\phi(x, z) &= \sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{ik_n x} \left\{ I_0(n) \cosh(k_n z) + \right. \\
&\quad \left. [I_d(n) - I_0(n) \cosh(k_n d)] \frac{\sinh(k_n z)}{\sinh(k_n d)} \right\}.
\end{aligned} \tag{4.32}$$

Para  $z = \frac{d}{2}$ , isto é, o perfil do diretor no centro da amostra, temos:

$$\phi(x, \frac{d}{2}) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{ik_n x} \frac{I_0(n) + I_d(n)}{2 \cosh(k_n \frac{d}{2})}. \tag{4.33}$$

Para o caso de ancoramento forte, a energia elástica por unidade de comprimento na direção  $y$  e no período  $\lambda$ , é calculada por meio da expressão já apresentada, isto é,

$$F = \frac{1}{2} K \int_0^\lambda dx \int_0^d dz \left[ \left( \frac{\partial \phi(x, z)}{\partial x} \right)^2 + \left( \frac{\partial \phi(x, z)}{\partial z} \right)^2 \right]. \tag{4.34}$$

Embora não seja muito simples, o cálculo não apresenta maiores dificuldades. Efetuando a integração em  $x$ , obtemos

$$\begin{aligned}
F &= \frac{1}{2} K \lambda \sum_{n=-\infty}^{\infty} \int_0^d [k_n^2 (A_n \cosh(k_n z) + B_n \sinh(k_n z)) \\
&\quad (A_{-n} \cosh(k_{-n} z) + B_{-n} \sinh(k_{-n} z)) + \\
&\quad k_n^2 (A_n \sinh(k_n z) + B_n \cosh(k_n z)) \\
&\quad (A_{-n} \sinh(k_{-n} z) + B_{-n} \cosh(k_{-n} z))] dz,
\end{aligned}$$

onde tivemos de usar o fato de

$$\int_0^\lambda e^{i(k_n - k_m)x} dx = \lambda \delta_{n-m}. \quad (4.35)$$

Efetuada os cálculos restantes, a energia elástica total, por unidade de comprimento, pode-se escrever na forma

$$F = \frac{K}{8\lambda} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \frac{1}{k_n} \{16n^2 \pi^2 [P_n \sinh^2(k_n d) - Q_n \sinh(2k_n d)]\}. \quad (4.36)$$

onde

$$P_n = (A_n B_{-n} + A_{-n} B_n) \quad \text{e} \quad Q_n = (|A_n|^2 + |B_n|^2). \quad (4.37)$$

Na situação de ancoramento fraco admitimos que a solução seja semelhante à do ancoramento forte fazendo a substituição de  $A_n$  por  $\tilde{A}_n$  e  $B_n$  por  $\tilde{B}_n$  como dada em (4.32). Podemos verificar que essa substituição é válida pois no caso do ancoramento forte  $L \rightarrow 0$  e, conseqüentemente  $\tilde{A}_n \rightarrow A_n$  e  $\tilde{B}_n \rightarrow B_n$ . Assim, a energia elástica assume a forma:

$$F = \tilde{F} + \frac{1}{2}W \int_0^\lambda [\phi(x, 0) - \Theta_0(x)]^2 dx + \frac{1}{2}W \int_0^\lambda [\phi(x, d) - \Theta_d(x)]^2 dx, \quad (4.38)$$

onde  $\tilde{F}$  se refere à energia elástica para situação de ancoramento forte, calculada acima, mas com  $A_n$  e  $B_n$  substituídos, respectivamente, por  $\tilde{A}_n$  e  $\tilde{B}_n$  (veja a Eq. (4.32)). Por outro lado, as condições de contorno são tais que

$$\phi(x, 0) = \Phi_0(x) + L \left( \frac{\partial \phi}{\partial z} \right)_{z=0} \quad \text{e} \quad \phi(x, d) = \Phi_d(x) - L \left( \frac{\partial \phi}{\partial z} \right)_{z=d}. \quad (4.39)$$

Em vista da solução geral obtida, temos

$$\begin{aligned} \phi(x, 0) &= \Phi_0(x) + L \sum_{n=-\infty}^{\infty} \tilde{B}_n e^{ik_n x} k_n, \\ \phi(x, d) &= \Phi_d(x) - L \sum_{n=-\infty}^{\infty} k_n [\tilde{A}_n \sinh(k_n d) + \tilde{B}_n \cosh(k_n d)] e^{ik_n x}, \end{aligned}$$

e a energia elástica total fica com a forma

$$F = \tilde{F} + \frac{1}{2}W L^2 \lambda \sum_{n=-\infty}^{\infty} k_n^2 f(n), \quad (4.40)$$

onde

$$f(n) = \left| \tilde{B}_n \right|^2 [1 + \cosh^2(k_n d)] + \left| \tilde{A}_n \right|^2 \sinh^2(k_n d) + (\tilde{A}_{-n} \tilde{B}_n + \tilde{A}_n \tilde{B}_{-n}) \sinh(k_n d) \cosh(k_n d).$$

Com as equações acima se completa a solução formal do problema de determinar o perfil de equilíbrio do diretor em uma amostra nemática cujas superfícies são caracterizadas por uma distribuição periódica dos eixos fáceis, seja na situação de ancoramento forte, seja numa situação de ancoramento fraco, que caracteriza, em geral, um problema matemático muito mais difícil de resolver.

Como última aplicação deste capítulo, e com o objetivo de conectar os resultados aqui obtidos com um problema de grande importância na literatura dos cristais líquidos, consideraremos o problema de um meio semi-infinito com uma distribuição periódica dos eixos fáceis. Trata-se do problema de Berreman[29] onde se assume que

$$\Theta_0(x) = A \operatorname{sen} qx, \quad (4.41)$$

onde  $q = 2\pi/\lambda$ . A solução para este problema pode ser obtida do caso geral anterior considerando o limite de uma amostra de grande espessura, isto é, fazendo o limite  $d \rightarrow \infty$  na expressão (4.32). Nesse caso, devemos ter

$$\phi(x, z) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{ik_n x} I_0(n) e^{-|k_n|z}, \quad (4.42)$$

pois admitiremos que a solução seja limitada quando  $z \rightarrow \infty$ . De igual maneira, o cálculo de  $I_0(n)$ , dado por (4.30), fornece

$$\begin{aligned}
I_0(n) &= \frac{A}{2\pi} e^{-2in\pi} \left( \frac{e^{2in\pi} - 1}{1 - n^2} \right) \\
&= \pm \frac{iA}{2}, \quad \text{se } n = \pm 1, \\
&= 0, \quad \text{se } n \neq \pm 1.
\end{aligned} \tag{4.43}$$

Usando o resultado (4.44) em (4.42) verifica-se, facilmente, que

$$\phi(x, z) = A \sin \left( \frac{2\pi}{\lambda} x \right) e^{-2\pi/\lambda z}, \tag{4.44}$$

que é, justamente, a solução encontrada por Berreman[29]. É claro que uma tal solução pode ser obtida por métodos mais simples do que o método aqui empregado. Contudo, pela sua importância, nós o estamos obtendo como um caso particular. Se agora calcularmos a energia total por unidade de área, obteremos

$$F_S = \int_0^\infty f(y) dy = \frac{1}{4} K A^2 q^3. \tag{4.45}$$

Essa energia está localizada sobre uma camada superficial cuja espessura é  $(2q)^{-1}$ . O resultado acima é obtido considerando-se que  $\phi(x, z)$  tenda a zero longe da superfície. Se, porém, considerarmos que a grandes distâncias o diretor adquira uma orientação fixa, tal que  $\vec{n} = (\sin \phi_0, 0, \cos \phi_0)$ , para valores arbitrários de  $\phi_0$ , a energia (4.45) pode ser reescrita como

$$F_S = \frac{1}{4} K A^2 q^3 \sin^2 \phi_0. \tag{4.46}$$

Se, agora, considerarmos a energia (4.46) como uma energia de superfície na forma  $F_S = 1/2 W' \sin^2 \phi$ , é possível introduzir um “comprimento de extrapolação” [26], que pode ser escrito como

$$L' = \frac{K}{W'} = \frac{2}{A^2 q^3} = \frac{\lambda^3}{4\pi^3 A^2}, \tag{4.47}$$

que pode ser estimado como sendo da ordem de  $1\mu m$  para um nemático típico. Esta análise simplificada mostra que o efeito de uma estrutura periódica na superfície - na situação de ancoramento forte - pode corresponder, para efeitos práticos, a uma situação de ancoramento fraco,

e, com isso, podemos introduzir um “comprimento de extrapolação” cujo valor é detectável experimentalmente.

## Capítulo 5

# COMPORTAMENTO DINÂMICO DA SUPERFÍCIE SOB A AÇÃO DE FORÇAS ENTRE DEFEITOS

Consideremos um *slab* de nemático de espessura  $d$ , com as superfícies que contêm a amostra tratadas com quatro ângulos diferentes como os mostrados na subseção (4.1.2). Porém, agora, vamos considerar que a separação dos segmentos tratados não ocorra no mesmo plano vertical, ou seja, a linha de disclinação na superfície inferior está defasada de uma distância horizontal  $\Lambda$  com relação à linha de disclinação na superfície superior, como mostra a figura (5.1):

Calcularemos também a energia elástica para uma configuração normal ( $\Lambda = 0$ ) e para uma configuração distorcida ( $\Lambda \neq 0$ ). Mostraremos que é possível definir uma força entre os defeito das superfícies que, dependendo das condições de contorno, pode ser atrativa ou repulsiva. Este problema foi considerado na referência[16] na hipótese de ancoramento forte. Nós o retomamos aqui, estendendo a análise para o caso de ancoramento fraco. As equações fundamentais já foram apresentadas nos capítulos anteriores, de modo que nos restringiremos à apresentação dos resultados principais. Nossa apresentação, para o caso de ancoramento forte, segue de perto o tratamento apresentado em[16].

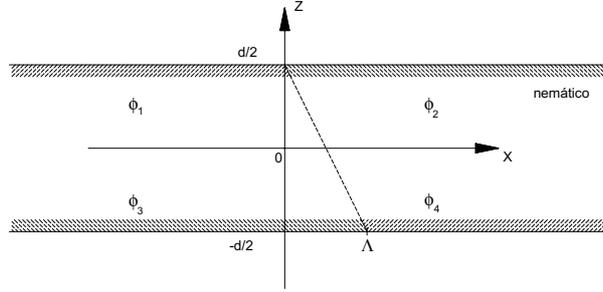


Figura 5-1: Amostra de espessura  $d$  com as superfícies tratadas com defasagem  $\Lambda$ .

Na situação de ancoramento forte podemos escrever esse ângulos como:

$$\Theta_+(x) = \begin{cases} \Theta_1, & x < 0 \\ \Theta_2, & x > 0 \end{cases} \quad \Theta_-(x) = \begin{cases} \Theta_3, & x < \Lambda \\ \Theta_4, & x > \Lambda \end{cases} \quad (5.1)$$

Temos, inicialmente, quatro superfícies caracterizadas por quatro diferentes direções fáceis.

O perfil do diretor pode ser calculado pela equação (4.8), isto é,

$$\begin{aligned} \phi(x, z) = & \Theta_1 \int_{-\infty}^0 G_+(x' - x, z) dx' + \Theta_2 \int_0^{\infty} G_+(x' - x, z) dx' \\ & + \Theta_3 \int_{-\infty}^{\Lambda} G_-(x' - x, z) dx' + \Theta_4 \int_{\Lambda}^{\infty} G_-(x' - x, z) dx'. \end{aligned}$$

Depois de realizar as integrações indicadas, obtemos

$$\phi(x, z) = \frac{(\Theta_1 + \Theta_2)}{\pi} t_1 + \frac{(\Theta_2 - \Theta_1)}{\pi} t_2 + \frac{(\Theta_3 + \Theta_4)}{\pi} t_3 + \frac{(\Theta_4 - \Theta_3)}{\pi} t_4, \quad (5.2)$$

onde as quantidades  $t_i$ ,  $i = 1, \dots, 4$  são definidas da seguinte forma (ver a Sec. (4.1))

$$t_1 = \arctan(\alpha(z)) \quad (5.3)$$

$$t_2 = \arctan \left[ \alpha(z) \tanh\left[\frac{\pi x}{2d}\right] \right] \quad (5.4)$$

$$t_3 = \arctan \left[ \frac{1}{\alpha(z)} \right] \quad (5.5)$$

$$t_4 = \arctan \left[ (\alpha(z))^{-1} \tanh\left[\frac{\pi(\Lambda - x)}{2d}\right] \right] \quad (5.6)$$

com

$$\alpha(z) = \frac{\cos\left[\frac{\pi z}{2d}\right] + \operatorname{sen}\left[\frac{\pi z}{2d}\right]}{\cos\left[\frac{\pi z}{2d}\right] - \operatorname{sen}\left[\frac{\pi z}{2d}\right]}. \quad (5.7)$$

## 5.1 Casos especiais

Existem várias configurações possíveis para essa situação, porém restringiremos nossa análise a apenas dois casos especiais, a saber:

I) Os ângulos caracterizando as direções fáceis são os seguintes:

$$\Theta_1 = \Theta_4, \quad \text{e} \quad \Theta_2 = \Theta_3. \quad (5.8)$$

A solução geral torna-se

$$\begin{aligned} \phi(x, z) = & \frac{(\Theta_1 + \Theta_2)}{2} \\ & + \frac{(\Theta_2 - \Theta_1)}{\pi} \arctan \left[ \frac{(1 + \sin(\frac{\pi z}{d})) \tanh[\frac{\pi x}{2d}] + (1 - \sin(\frac{\pi z}{d})) \tanh[\frac{\pi(\Lambda - x)}{2d}]}{\cos(\frac{\pi z}{d})(1 + \tanh[\frac{\pi x}{2d}] \tanh[\frac{\pi(\Lambda - x)}{2d}])} \right] \end{aligned} \quad (5.9)$$

II) Os ângulos caracterizando as superfícies são os seguintes:

$$\Theta_1 = \Theta_3 \quad \text{e} \quad \Theta_2 = \Theta_4 \quad (5.10)$$

A expressão para  $\phi(x, z)$  que obtemos neste caso é

$$\phi(x, z) = \frac{(\Theta_1 + \Theta_2)}{2} - \frac{(\Theta_2 - \Theta_1)}{\pi} \arctan \left[ \frac{(1 + \sin(\frac{\pi z}{d})) \tanh[\frac{\pi x}{2d}] - (1 - \sin(\frac{\pi z}{d})) \tanh[\frac{\pi(\Lambda-x)}{2d}]}{\cos(\frac{\pi z}{d})(1 - \tanh[\frac{\pi x}{2d}] \tanh[\frac{\pi(\Lambda-x)}{2d}])} \right] \quad (5.11)$$

As soluções (5.9) e (5.11) descrevem paredes de orientação induzidas na amostra em virtude das inhomogeneidades presentes nas superfícies que a limitam[15]. Em ambas as situações temos uma amostra de espessura  $d$  com duas disclinações localizadas em  $x = 0, z = d/2$  e  $x = \Lambda, z = -d/2$ .

Consideremos, agora, na situação de ancoramento fraco, os mesmos casos especiais tratados anteriormente na situação de ancoramento forte. Nessa situação devemos considerar-como já sabemos -condições de contorno do tipo mista (veja a Sec.(3.2)). Embora já tenhamos apresentado as equações fundamentais do modelo que estamos tratando, convém, aqui, rerepresentá-las para deixar clara a essência do procedimento perturbativo que usaremos.

As condições de contorno a serem satisfeitas são

$$\pm L \left[ \frac{\partial \theta}{\partial z} \right]_{z=\pm d/2} + \phi_{\pm}(x) - \Theta_{\pm}(x) = 0. \quad (5.12)$$

A solução geral pode ser escrita na forma (veja-se a Eq. (??) )

$$\phi_W(x, z) = \int_{-\infty}^{\infty} [G_+(x' - x, z)\phi_+(x') + G_-(x' - x, z)\phi_-(x')] dx'. \quad (5.13)$$

Usando (5.12) teremos

$$\phi_{\pm} = \Theta_{\pm} \mp L \int_{-\infty}^{\infty} dx' \left[ \phi_+(x') \frac{\partial G_+(x - x', z)}{\partial z} + \phi_-(x') \frac{\partial G_-(x - x', z)}{\partial z} \right]_{z=\pm d/2}. \quad (5.14)$$

A solução acima, como salientamos anteriormente, é a solução formal exata do problema. As equações (5.14) são as duas equações integrais que já encontramos e discutimos usamos métodos gerais[18]. Contudo, para os propósitos deste cálculo que apresentaremos, é suficiente considerar uma solução perturbativa em primeira ordem em  $L$ . Essa solução tem significado somente quando  $W$  é suficientemente grande, isto é, quando o comprimento de extrapolação é pequeno quando comparado à espessura da amostra. Nesse caso, em primeira ordem em  $L$  teremos

$$\phi_{\pm}(x) = \Theta_{\pm}(x) \mp L \int_{-\infty}^{\infty} dx' \left[ \Theta_{+}(x') \frac{\partial G_{+}(x-x', z)}{\partial z} + \Theta_{-}(x') \frac{\partial G_{-}(x-x', z)}{\partial z} \right]_{z=\pm d/2}. \quad (5.15)$$

E para as condições de contorno (5.12), agora apropriadamente modificadas para respeitar a ordem do tratamento perturbativo, teremos

$$\phi_{+}(x) = \begin{cases} \Theta_1 - L\epsilon(\Lambda, x), & x < 0 \\ \Theta_2 - L\epsilon(\Lambda, x), & x > 0 \end{cases}$$

e

$$\phi_{-}(x) = \begin{cases} \Theta_3 + L\eta(\Lambda, x), & x < \Lambda \\ \Theta_4 + L\eta(\Lambda, x), & x > \Lambda, \end{cases}$$

onde

$$\epsilon(\Lambda, x) = \frac{1}{2d} \left[ A + B \coth \left[ \frac{\pi x}{2d} \right] + C \tanh \left[ \frac{\pi(\Lambda - x)}{2d} \right] \right] \quad (5.16)$$

e

$$\eta(\Lambda, x) = \frac{1}{2d} \left[ A + B \tanh \left[ \frac{\pi x}{2d} \right] + C \coth \left[ \frac{\pi(\Lambda - x)}{2d} \right] \right], \quad (5.17)$$

onde, para compactar a notação fizemos  $A = \Theta_1 + \Theta_2 - \Theta_3 - \Theta_4$ ,  $B = \Theta_2 - \Theta_1$ , e  $C = \Theta_4 - \Theta_3$ .

A solução  $\phi_W(x, z)$  (para o caso de ancoramento fraco) pode ser obtida, após cálculos não muito simples, na forma

$$\phi_W(x, z) = \phi_S(x, z) + L\bar{\phi}_W(x, z), \quad (5.18)$$

onde

$$\bar{\phi}_W = \frac{1}{\pi d} \arctan \left( \frac{1}{\cos \left( \frac{\pi z}{d} \right)} \right) \left[ A + B \frac{\sinh \left( \frac{\pi x}{d} \right)}{\cosh \left( \frac{\pi x}{d} \right) - \sin \left( \frac{\pi z}{d} \right)} + C \frac{\sinh \left( \frac{\pi(\Lambda - x)}{d} \right)}{\cosh \left( \frac{\pi(\Lambda - x)}{d} \right) + \sin \left( \frac{\pi z}{d} \right)} \right] \quad (5.19)$$

Na expressão acima  $\phi_S(x, z)$  é a solução para o caso de ancoramento forte já apresentada. No limite de ancoramento forte ( $L \rightarrow 0$ ),  $\phi_W(x, z) \rightarrow \phi_S(x, z)$ , como se espera.

## 5.2 Energia elástica e força entre defeitos

A energia elástica,  $F$ , de nosso sistema pode ser calculada a partir das expressões que introduzimos no Cap. III (especificamente, Eqs. (3.4) e (3.8) respectivamente para os casos de ancoramento forte e fraco). Devido à presença de um deslocamento relativo  $\Lambda$  entre as disclinações nas superfícies,  $F$ , em ambas as situações torna-se função de  $\Lambda$ . Se admitirmos que a configuração de referência é aquela em que  $\Lambda = 0$  (que corresponde ao caso tratado na Sec.(4.1)), é possível definir um ‘excesso’ de energia elástica relativamente a essa configuração, na forma

$$E(\Lambda) = F(\Lambda) - F(\Lambda = 0). \quad (5.20)$$

A partir de considerações dimensionais, podemos definir uma força, por unidade de comprimento ao longo de  $y$ , entre os defeitos de superfície, cuja componente na direção  $x$  é dada por

$$f(\Lambda) = -\frac{\partial E(\Lambda)}{\partial \Lambda}. \quad (5.21)$$

Dependendo das condições de contorno, pode-se mostrar que a força pode ser atrativa ou repulsiva. Por simplicidade, consideraremos apenas o segundo caso tratado anteriormente, na hipótese de ancoramento fraco. Obtemos a seguinte expressão

$$f(\Lambda) = -K \frac{(\Theta_2 - \Theta_1)^2}{2d} \left[ \left(1 + 2\frac{L}{d}\right) \tanh\left(\frac{\pi\Lambda}{2d}\right) + L \frac{\pi\Lambda}{d \cosh^2\left(\frac{\pi\Lambda}{2d}\right)} \right]. \quad (5.22)$$

Observe-se que, no caso de ancoramento fraco, ( $L \rightarrow 0$ ), obtemos

$$f(\Lambda) = -K \frac{(\Theta_2 - \Theta_1)^2}{2d} \tanh\left(\frac{\pi\Lambda}{2d}\right). \quad (5.23)$$

Para o caso em que  $\Lambda \ll d$ ,  $f(\Lambda) \propto -\Lambda$ .

### 5.2.1 Efeito da força sobre o movimento da superfície

Uma aplicação experimental dos resultados que obtivemos neste trabalho poderia surgir se considerássemos um arranjo tal que uma das superfícies - suponhamos a superior - pudesse estar livre, enquanto que a segunda estaria fixada. Se a força entre os defeitos for suficientemente intensa, a possibilidade de que a superfície se mova sob sua ação existe. Uma situação experimental desse tipo é, em tese, possível, pois não viola nenhum princípio físico. Trata-se, porém, de um eventual experimento de difícil realização. Não obstante essas objeções práticas quase que intransponíveis, nós admitiremos a possibilidade de o problema matemática representar uma potencial situação experimental. Tendo em mente essas observações analisaremos o movimento da superfície superior, sob a ação dessa força.

Admitiremos que a superfície superior é livre para mover-se e no instante  $t = 0$  se encontra em repouso, de modo tal que a distância horizontal entre os defeitos seja  $\Lambda > 0$  (Fig. 5.1). Como o meio nemático é viscoso, admitiremos, também que ele apresente uma viscosidade efetiva  $\bar{\gamma}$ [30]. A superfície pode realizar oscilações amortecidas governadas pela equação

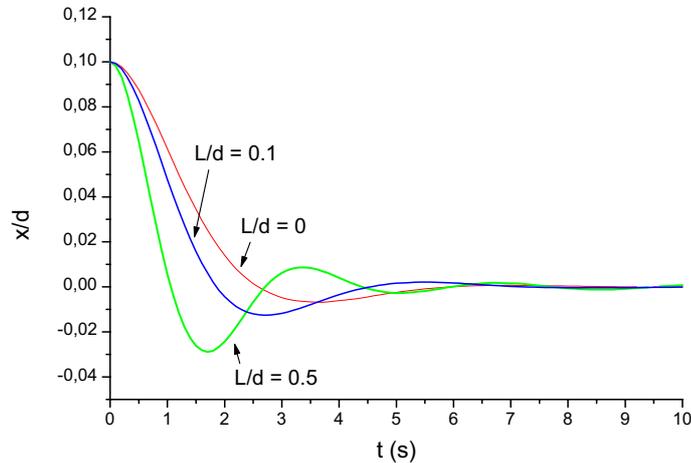
$$\mu \frac{d^2x}{dt^2} + 2\bar{\gamma}b \frac{dx}{dt} + f(x) = 0, \quad (5.24)$$

onde  $\mu$  é a massa da superfície, por unidade de comprimento,  $b$  é um número da ordem da unidade [30] e  $x = \Lambda$ , de modo que  $f(x)$  representa a força determinada em (5.22). A Eq. (5.24) é uma equação diferencial não-linear para a qual é difícil encontrar soluções exatas. Entretanto, se considerarmos valores típicos para os parâmetros experimentais, soluções numéricas podem ser obtidas com bom grau de confiabilidade. Foi o que fizemos, por meio do programa MATHEMATICA.

Se considerarmos um cristal líquido convencional como o MBBA, podemos empregar[1]:  $\bar{\gamma} = 0.76 \text{ dyn/cm}^2 \text{ s}$ ,  $K = 7 \times 10^{-7} \text{ dyn}$ . Admitiremos que a espessura da amostra é  $d = 10 \text{ }\mu\text{m}$ , e que  $\mu = 0.5 \text{ g/cm}$ . Por fim, vale a pena lembrar que a máxima diferença entre os eixos fáceis impostos pelas superfícies deve ser  $\pi/2$ .

Com esses parâmetros, a Eq. (5.24) foi resolvida para alguns valores representativos de  $L/d \ll 1$ . Na Fig. (5.2) exibimos soluções para  $L/d = 0$ ,  $L/d = 0.1$  e  $L/d = 0.5$ . Observamos que no caso de ancoramento forte,  $L = 0$ , o decaimento da solução é muito rápido, e o sistema tende a oscilar mais rapidamente com o crescimento de  $L$ . Apesar de estarmos no limite perturbativo ( na verdade, os cálculos acima valem apenas para pequenos valores de  $L/d$ )

verifica-se que o efeito de uma energia de ancoramento finita é o de permitir que o sistema oscile mais rapidamente. O problema apresenta-se estruturalmente semelhante ao problema do oscilador amortecido em seus diversos regimes.



Diante desse quadro, e para concluir a análise, podemos imaginar a possibilidade de um experimento destinado a medir a energia de ancoramento a partir do movimento da superfície. Ressalvadas todas as dificuldades experimentais envolvidas, podemos imaginar um experimento como segue.

No instante  $t = 0$  a superfície superior parte do repouso, a uma distância horizontal de defasagem  $\Lambda \neq 0$ , conhecida e determinada experimentalmente. Abandonada sob a ação da força a superfície se move como é previsto pela solução que apresentamos acima. Por meio de um dispositivo apropriado, pode-se filmar todo o processo. Em particular, pode-se medir o tempo necessário para que as duas linhas de disclinação entrem em fase. Da mesma forma como encontramos uma solução numérica para o problema, uma solução perturbativa pode ser encontrada, ao menos para intervalos de tempo pequenos, compatíveis com o tempo do experimento. Encontrada essa solução perturbativa, analítica, e conhecido o tempo anteriormente mencionado, o único parâmetro desconhecido no sistema seria o comprimento de extrapolação. Desse modo, admitindo-se que um tal experimento seja realizável, encontramos um método independente para a medida da energia de ancoramento em uma amostra nemática.

Para finalizar, vale a pena insistir sobre um fato: o experimento, em princípio é possível, mas inegavelmente muito difícil. Em todo o caso, o formalismo apresentado, além de ser útil

em outras situações experimentais mais conhecidas, poderia servir de base para a interpretação de um novo contexto experimental. Independentemente disso, porém, o problema matemático é, em si mesmo, bastante instigante e será objeto de ulteriores análises.

## Capítulo 6

# CONCLUSÃO

Neste trabalho consideramos o problema matemático de determinar o perfil do diretor em uma amostra líquido-cristalina limitada por superfícies inomogêneas. Apresentamos um modelo matemático completo, e suficientemente rigoroso, para determinar a configuração de equilíbrio para o caso de um arranjo em que o diretor permanece no plano. Como trabalhamos na aproximação de uma única constante elástica, o problema - simplificado - pôde ser tratado em grande generalidade. Ele consistiu em procurar funções harmônicas para a solução da equação de Laplace, satisfazendo dois tipos fundamentais de condições de contorno nas superfícies que limitam a amostra. É bem provável que, guardadas as restrições na proposição do problema, o modelo que apresentamos seja o mais geral possível. Merece uma menção particular a solução exata do problema de Dirichlet e do problema misto, para o caso em que a superfície inomogênea é caracterizada por uma distribuição periódica dos eixos fáceis.

A presença de superfícies inomogêneas é a responsável pelo surgimento de defeitos no meio nemático, no contexto do problema que estamos considerando. À presença desses defeitos, por sua vez, se pode associar uma força. Essa força entre defeitos foi calculada de maneira exata para o caso de ancoramento forte e de modo perturbativo para o caso de ancoramento fraco. Admitindo que uma das superfícies de uma amostra se possa mover sob a ação dessa força, demos início a uma investigação do comportamento dinâmico dessa superfície. Mostramos que esse comportamento é governado por uma equação diferencial linear para a qual, aparentemente,

é muito difícil encontrar soluções exatas. Contudo, o problema pode ser afrontado por métodos numéricos, e nós o fizemos para valores significativos dos parâmetros envolvidos (que caracterizam o meio nemático). Também conjecturamos acerca da possibilidade de o formalismo apresentado - cálculo da força e comportamento dinâmico da superfície - poder ser interpretado num contexto experimental novo, onde a energia de ancoramento de uma amostra real pudesse ser determinada por um método que não envolve a aplicação de campos externos. Nesse sentido, os resultados preliminares apresentados abrem a perspectiva de uma ulterior abordagem de fenômenos não lineares nesse contexto.

Uma possível - e até mesmo necessária - extensão das idéias apresentadas deveria tratar deformações no plano, como as que consideramos, mas levando em conta a anisotropia elástica. Mais precisamente, o problema deve ser reformulado desde o seu início, admitindo-se que  $K_{11} \neq K_{33}$ , como ocorre experimentalmente. Nesse caso, por ser mais geral e mais realista do ponto de vista prático, uma série de problemas novos e recentes, envolvendo células bi-estáveis poderia ser afrontada.

# Bibliografia

- [1] P. G. de Gennes, *The Physics of Liquid Crystals*, (Oxford University Press, Oxford, 1974).
- [2] S. Faetti, *Mol. Cryst. Liq. Cryst.* **179**, 217 (1990).
- [3] S. Faetti, in *Physics of Liquid Crystalline Materials*, ed. I. C. Khoo and F. Simoni, (Gordon and Breach, 1982), p. 301.
- [4] H. Yokoyama, *Mol. Cryst. Liq. Cryst.* **108**, 317 (1988).
- [5] B. Jérôme, *Rep. Prog. Phys.* **54**, 391 (1991).
- [6] J. Nehring, A. R. Kmetz, and T. J. Sheffer, *J. Appl. Phys.* **47**, 850 (1976).
- [7] K. H. Yang, and C. Rosenblatt, *Appl. Phys. Lett.* **43**, 62 (1983).
- [8] J. Bernasconi, S. Strassler, and H. R. Zeller, *Phys. Rev. A* **22**, 276 (1980).
- [9] J. D. Parson, *J. Phys. France* **37**, 1187 (1976).
- [10] G. Barbero, T. Beica, A. L. Alexe-Ionescu, and R. Moldovan, *J. Phys. II France* **2**, 2011 (1992).
- [11] M. Monkade, M. Boix, and G. Durand, *Europhys. Lett.* **5**, 697 (1988).
- [12] J. Cognard, *Mol. Cryst. Liq. Cryst. Suppl.* **1 78**, 1 (1982).
- [13] H. Yokoyama, S. Kobayashi, and H. Kamei, *J. Appl. Phys.* **56**, 2645 (1984).
- [14] L. R. Evangelista, and G. Barbero, *Phys. Rev. E* **48**, 1163 (1993).
- [15] L. R. Evangelista, and G. Barbero, *Phys. Rev. E* **50**, 2120 (1994).

- [16] F. C. Cardoso, and L. R. Evangelista, *Phys. Rev. E* **53**, 1265 (1996).
- [17] L. R. Evangelista, *Phys. Lett. A* **205**, 203 (1995).
- [18] P. M. Morse and H. Feshbach, *Methods of Theoretical Physics* (McGraw-Hill, New York, 1953), Vol. I, Ch. 8.
- [19] E. Butkov, *Mathematical Physics*, (Addison-Wesley, New York, 1968).
- [20] F. C. Cardoso, *Defeitos de Superfícies e Forças em Amostras Nemáticas Limitadas*, Monografia de Graduação, Universidade Estadual de Maringá, 1996.
- [21] V. Tsvetkov, *Acta Physicochym. (USSR)*, **16**, 132 (1942).
- [22] G. Barbero, and L. R. Evangelista, *An Elementary Course on the Continuum Theory for Nematic Liquid Crystals*, (World Scientific, Singapore, 2000).
- [23] J. F. Nye, *Physical Properties of Crystals*, (Clarendon, Oxford, 1957).
- [24] F. C. Frank, *Discuss. Faraday Soc.* **25**, 19 (1958).
- [25] A. Rapini and M. Papoular, *J. Phys. (Paris) Colloq.* **30**, C4-54 (1969).
- [26] M. Kléman, *Points, Lignes, Parois* (Editions de Physique, Les Ulis, Orsay, 1977).
- [27] Estamos chamando de problema misto de Neumann-Dirichlet, o que em alguns livros textos é chamado de problema intermediário. Um texto padrão, como por exemplo, Butkov, chama de problema misto aquele que especifica condições de contorno que, a um só tempo, misturam as extremidades do problema. Nós continuaremos a usar a mesma terminologia mesmo no caso de uma amostra de espessura finita.
- [28] G. Barbero, R. Barberi, in *The Physics of Liquid Crystalline Materials*, edited by I. C. Khoo and F. Simoni (Gordon and Breach, 1988).
- [29] D. Berreman, *Phys. Rev. Lett.* **28**, 1683 (1972).
- [30] P. E. Cladis, W. van Saarloos, P. L. Finn, and A. R. Kortan, *Phys. Rev. Lett.* **58**, 222 (1987).