

LUÍS NOBRE GONÇALVES

REORIENTAÇÃO MAGNÉTICA  
DE NEMÁTICOS  
EM  
CÉLULAS PLANARES

Lisboa

2003

nº de arquivo

copyright

Dissertação apresentada para obtenção do Grau de  
Doutor em Engenharia Física, Física Aplicada,  
pela Universidade Nova de Lisboa,  
Faculdade de Ciências e  
Tecnologia.  
2003

ESTUDO DO PROCESSO DE REORIENTAÇÃO  
DO CAMPO DO DIRECTOR POR ACÇÃO  
DE UM CAMPO MAGNÉTICO NUMA  
FASE NEMÁTICA CONFINADA

*Et propter vitam, vitæ perdere causas*

# AGRADECIMENTOS

Devo um agradecimento muito profundo aos meus orientadores científicos, o *Professor* João Figueirinhas e o *Professor* João Casquilho, que se propuseram orientar-me logo depois do Mestrado. A criatividade, rigor e empenho que demonstraram ao longo dos vários anos de trabalho foram determinantes para a elaboração desta tese.

A ambos agradeço o facto de terem sempre insistido amigavelmente para que eu fizesse, de entre o necessário e o importante, o que tinha mais dificuldades em concretizar.

Lanço uma palavra de sincero agradecimento a todos quantos, de uma forma ou de outra, me apoiaram e incentivaram. Nesta pequena frase incluo muitas e excelentes pessoas, muitos e preciosos momentos, que não menciono explicitamente por simples incapacidade literária.

No entanto, tenho o dever de mencionar algumas pessoas porque o que fizeram por mim ultrapassa largamente o seu próprio dever institucional: o *Professor* António Ribeiro teve uma influência extremamente positiva nas ocasiões mais melindrosas, como no arranque, em algumas opções de fundo e no fim do trabalho de doutoramento; o *Mestre* José Esteves implementou e divulgou uma infraestrutura informática que permanece subjacente a muitos trabalhos científicos e em particular esta tese; Vitor Viana contribuiu significativamente para o *design* da máquina que produziu os resultados experimentais aqui apresentados; finalmente, o meu irmão constitui a única entidade privada que para além de tudo o resto também financiou este trabalho.

Agradeço ao INICT o financiamento do projecto PRAXIS XXI, no âmbito do qual foi realizada esta tese, intitulado “Implementação de tecnologias avançadas para o

fabrico de dispositivos electro-ópticos e sensores piroeléctricos de cristal líquido. Estudos fundamentais para caracterização dos sistemas a utilizar” (3/3.1/MMA/1769/95).

Agradeço também a bolsa PRODEP 1/96, concedida ao Departamento de Física da UNL pelo Ministério da Educação, e o subsídio para a edição desta tese concedido pela Fundação para a Ciência e Tecnologia.

# RESUMO

Estudamos teoricamente as transições de Fréedericksz nas geometrias intermédias entre: (i) afinilamento e torção; (ii) torção e flexão; e (iii) flexão e afinilamento. Foram determinadas as condições em que a transição entre o estado não deformado e o estado homogeneamente deformado (transição de Fréedericksz usual) é substituída pela transição entre o estado não deformado e o estado deformado com estrutura periódica.

Também estudamos teórica e experimentalmente a dinâmica de reorientação do campo do director após rotação súbita da amostra num campo magnético uniforme. Consideramos monodomínios de cristais líquidos nemáticos uniaxiais não quirais diamagnéticos de baixo peso molecular, contidos entre duas fronteiras planas uniformes paralelas e rígidas com alinhamento planar. Simulamos e reproduzimos, na geometria de torção, toda a evolução do campo do director desde o momento em que se impõe uma rotação súbita e até ao instante em que se observa a formação de bandas.



# ABSTRACT

We study theoretically Fréedericksz transitions in the: (i) splay-twist; (ii) twist-bend; and (iii) bend-splay intermediate geometries. We found the conditions for the replacement of the usual Fréedericksz transition by a transition from the uniform state to a periodic state.

We also study theoretically and experimentally the reorientation dynamics of the nematic director after a sudden rotation of the sample in a magnetic field. We assume monodomains of diamagnetic non-chiral uniaxial nematic liquid crystals of low molecular weight, contained in between two parallel planar uniform rigid frontiers. We simulate and reproduce the whole reorientation process in the twist geometry since the sudden sample rotation up to the formation of stripes.

# SOMMAIRE

Nous étudions théoriquement les transitions de Frederiks dans les geometries intermédiaes entre: (i) le éventail et la torsion; (ii) la torsion et la flexion; et (iii) la flexion et le éventail. Nous avons déterminé les conditions pour que la transition entre l'état non-déformé et l'état homogène (la transition de Frederiks usuel) soit remplacée par la transition entre l'état non-déformé et l'état périodique.

Nous étudions aussi théoriquement et expérimentalement la dynamique de reorientation du champ du directeur nématique après une rotation subite de l'échantillon dans un champ magnétique uniforme. Nous considérons des monodomains de cristaux liquides nématiques uniaxiaux non-quiraux diamagnétiques de basse poids moléculaire, contenus entre deux frontières planes uniformes parallèles et rigides avec alignement planaire. Nous simulons et reproduisons tout le processus de reorientation en la géométrie de torsion dès la rotation subite jusqu'à la formation des bandes.

# SIMBOLOGIA E NOTAÇÕES

Embora as normas [50] recomendem o símbolo  $\kappa$  para a susceptibilidade magnética, continuamos a utilizar o símbolo  $\chi$  tal como é tradicional em cristais líquidos.

## SIMBOLOGIA

Escolhemos escrever os símbolos matemáticos como se apenas dispuséssemos de um lápis ou de um giz, sem negrito. Indicamos valores reduzidos adimensionais pelo índice  $r$ , como em  $X_r$ , e valores críticos pelo expoente  $\star$  (estrela), como em  $X^\star$ .

## SÍMBOLOS MATEMÁTICOS

### LETRAS GREGAS

- $\alpha_i$  Coeficientes de viscosidade de Leslie ( $i = 1 \dots 6$ ).
- $\gamma_1$  Viscosidade rotacional.
- $\zeta$  Tensão de orientação.
- $\eta$  Viscosidade aparente.
- $\eta_a$  Viscosidade de Miesowicz.
- $\eta_b$  Viscosidade de Miesowicz.
- $\eta_c$  Viscosidade de Miesowicz.
- $\eta_f$  Viscosidade efectiva em flexão pura (3.51).
- $\vartheta$  Ângulo entre o campo magnético e o director.
- $\lambda$  Comprimento de onda da distorção que se forma durante a reorientação periódica.

$\Lambda$	Parâmetro de controle ou conjunto dos parâmetros de controle.
$\mu$	Permeabilidade magnética.
$\nu_1$	Viscosidade elongacional.
$\xi_1$	Comprimento de coerência magnética na geometria de afinamento puro.
$\xi_2$	Comprimento de coerência magnética na geometria de torção pura.
$\xi_3$	Comprimento de coerência magnética na geometria de flexão pura.
$\Xi$	Conjunto dos parâmetros de definição da geometria.
$p$	Pressão. Na figura 1.1 o símbolo $p$ representa o passo da hélice colestérica.
$\pi_{ij}$	Tensor dos esforços de orientação.
$\Pi_i$	Componente da densidade de força de inércia.
$\rho$	Massa específica.
$\rho_1$	Momento de inércia específico.
$\sigma_{ij}$	Tensor dos esforços.
$\sigma_{ij}^0$	Parte elástica do tensor dos esforços.
$\sigma'_{ij}$	Parte viscosa do tensor dos esforços.
$\Sigma_i$	Componente da densidade de força dissipativa.
$\tau$	Constante com dimensões de tempo.
$\tau_{\text{H}}$	Tempo característico de reorientação homogénea na geometria de torção.
$\tau_{\text{P}}$	Tempo característico de reorientação periódica na geometria de torção.
$\tau_2$	Tempo de referência na geometria de torção (3.33).
$v$	Ângulo entre o director e a orientação instantânea de uma molécula.
$\Upsilon$	Parâmetro de configuração ou conjunto dos parâmetros de configuração.
$\Upsilon'$	Amplitude angular de configuração..
$\chi_a$	Anisotropia da susceptibilidade magnética.
$\Psi$	Ângulo de inclinação das bandas ou paredes. Ângulo entre o campo magnético e as bandas ou paredes.
$\Omega$	“Volume” arbitrário. As aspas são para lembrar que este volume pode ter apenas uma ou duas dimensões em vez das três usuais.

LETRAS ROMÂNICAS VÁRIAS

- $\mathcal{A}$  Ver a equação (2.44).
- $A_{\max}$  Amplitude máxima do espectro de potência.
- $C, D \dots$  Valores arbitrários.
- $a, b, c, d \dots$  Valores arbitrários.
- $A_{ij}$  Parte simétrica do tensor dos gradientes de velocidade.
- $\mathcal{D}$  Determinante da matriz da estabilidade.
- $d_c$  Espessura das células de cristal líquido ou distância entre as fronteiras planas do “volume”  $\Omega$  na direcção do eixo dos  $zz$ .
- $D_{ij}$  Tensor dos gradientes de velocidade.
- $\mathcal{E}$  Matriz da estabilidade.
- $f$  Densidade de energia livre de orientação.
- $F$  Densidade média (no espaço) de energia livre de orientação.
- $f_1$  Densidade de energia livre de afunilamento.
- $f_3$  Densidade de energia livre de flexão.
- $f_m$  Densidade de energia livre magnética.
- $f_s$  Densidade de energia livre de curvatura em sela.
- $F_s$  Densidade média de energia livre de curvatura em sela.
- $f_2$  Densidade de energia livre de torção.
- $\vec{g}$  Força de orientação.
- $\vec{g}'$  Força de orientação dissipativa.
- $\vec{G}$  Força extrínseca.
- $\hat{h}$  Versor do campo magnético.
- $\vec{H}$  Campo magnético.
- $H$  Intensidade do campo magnético.
- $\vec{\mathcal{H}}$  Campo molecular.
- $H_r$  Intensidade do campo magnético reduzido (adimensional).
- $\mathcal{J} = \vec{n} \cdot \text{rot } \vec{n}$  Torção do director.

$\mathcal{K}_{\alpha/\beta} = K_\alpha/K_\beta$  Quociente de constantes elásticas.

$\vec{\mathcal{L}} = \vec{n} \times \text{rot } \vec{n}$  Flexão do director.

$K_1$  Constante elástica de afunilamento.

$K_2$  Constante elástica de torção.

$K_3$  Constante elástica de flexão.

$K_4$  Constante elástica de curvatura em sela.

$\vec{M}$  Magnetização .

$\mathcal{M}$  Força magnética (2.14).

$\mathcal{M}^{**}$  Força magnética crítica para a reorientação periódica na geometria de torção “non-Fréedericksz” .

$\mathcal{M}_a^*$  Força magnética crítica para a transição de Fréedericks na geometria de afunilamento puro.

$\mathcal{M}_{af}^*$  Força magnética crítica para a transição de Fréedericks na geometria intermédia de afunilamento-flexão.

$\mathcal{M}_{aft}^*$  Força magnética crítica para a transição de Fréedericks na geometria geral de afunilamento-flexão-torção.

$\mathcal{M}_{at}^*$  Força magnética crítica para a transição de Fréedericks na geometria intermédia de afunilamento-torção.

$\mathcal{M}_f^*$  Força magnética crítica para a transição de Fréedericks na geometria de flexão pura.

$\mathcal{M}_t^*$  Força magnética crítica para a transição de Fréedericks na geometria de torção pura.

$\mathcal{M}_t^{**}$  Força magnética crítica para a reorientação periódica na geometria de torção pura.

$\mathcal{M}_{tf}^*$  Força magnética crítica para a transição de Fréedericks na geometria intermédia de torção-flexão.

$\vec{n}$  Campo do director.

$\vec{N}$  Velocidade de variação de  $\vec{n}$  relativamente ao fluido circundante.

$\mathcal{N}$	Constante de normalização .
$p$	Pressão hidrostática.
$q$	Amplitude do vector de onda da distorção ( $q = 2\pi/\lambda$ ).
$\vec{Q}$	Parâmetro de ordem tensorial.
$q_{\parallel}$	Componente do vector de onda na direcção horizontal, paralela ao campo magnético.
$q_{\perp}$	Componente do vector de onda na direcção vertical, perpendicular ao campo magnético.
$S$	Parâmetro de ordem uniaxial.
$\mathcal{S}$	Força de uma disclinação.
$T$	Duração da rotação súbita da amostra nos estudos experimentais em §4.
$t_m$	Tempo necessário para atingir a amplitude espectral máxima do modo linear (§4.5).
$\vec{v}$	Campo de velocidades.
$w_{ij}$	Parte antissimétrica do tensor dos gradientes de velocidade.
$\mathcal{X}$	Ver a equação (2.42).
$\mathcal{Z}$	Ver a equação (2.43).

## SIGLAS

CD	Disco Compacto
CL	Cristais Líquidos
E-L	Ericksen-Leslie
FPS	Taxa de aquisição de imagens. Fotogramas por segundo.
LCNMR	(Grupo de) Cristais Líquidos e Ressonância Magnética Nuclear
MMC	Mecânica dos Meios Contínuos
N	Cristal líquido de tipo nemático
N*	Cristal líquido de tipo nemático quirais
N <sub>u</sub>	Cristal líquido de tipo nemático uniaxial
N <sub>b</sub>	Cristal líquido de tipo nemático biaxial

## NOTAÇÃO

### TIPOS DE LETRA

Os estrangeirismos são escritos em itálico. Um dos estrangeirismos que aparecerá ocasionalmente é *Ansatz* que quer dizer “função de ensaio” ou “parametrização preferida”. O seu plural é *ansätze*. Os símbolos identificativos de regiões de algum espaço de parâmetros são escritos assim. Os nomes de marcas de produtos são escritos como T A L M A R C A . Nomes de ficheiros, código fonte e linhas de comando são escritos em tamanho fixo. As palavras marcadas desta maneira são incluídas no índice e as *inclinadas* não têm uma categoria definida.

### DISTINÇÕES

O símbolo § substitui as palavras capítulo, secção, subsecção ou subsubsecção mas refere-se a esta tese quando entre parêntesis curvos e refere-se a obras citadas quando entre parêntesis rectos. Por exemplo,

(ver §2.3.1) refere-se a uma subsecção desta tese e  
[4, §2.6] refere-se à secção 2.6 da referência [4].

Ao fundo de cada página são indicados não só o número da página do lado direito mas também o número da subsecção corrente do lado esquerdo.

Aquilo que, nesta tese, se designa por distorção ou deformação *periódica* é, em algumas referências, designado por distorção *inhomogénea*. De facto, as distorções a que nos referimos são periódicas no espaço e não no tempo.

### ESTRUTURAS LÓGICAS

No início de alguns capítulos inserimos citações latinas como, por exemplo:



cujos significados são descritos em §G.

Por vezes, é vantajoso listar os pressupostos assumidos numa dedução ou argumentação. A listagem de pressupostos tem o seguinte aspecto:

- O zero tem valor nulo.
- De manhã chove.
- Alguém erra.

## DIFICULDADE PRÁTICA

Era pretendido escrever valores numéricos separando as unidades e as décimas com uma vírgula, tal como é costume na Europa. No entanto, dado que o *software* de produção de gráficos é de origem americana, a nossa pretensão não é aplicada nas marcações numéricas das escalas dos gráficos. Por outro lado, o *software* de formatação de texto  $\text{\LaTeX}$  (também de origem americana) representa as funções seno e tangente pelas abreviações *sin* e *tan*.

## MATERIAL ADICIONAL – CD

Procurou-se tornar esta tese interactiva integrando-lhe dois discos compactos (CDs) com *software* utilizado e/ou desenvolvido pelo autor num CD (“LNGsoft”) e com uma selecção dos dados experimentais noutra CD (“MPEG1”). Se os CDs já estão a queimar os seus dedos, passe imediatamente à secção A e não deixe de consultar §A.2 acerca da codificação dos nomes dos ficheiros de sequências de imagens experimentais.

# CONTEÚDO

AGRADECIMENTOS	II
RESUMO	IV
ABSTRACT	V
SOMMAIRE	VI
SIMBOLOGIA E NOTAÇÕES	VII
Simbologia . . . . .	VII
Símbolos Matemáticos . . . . .	VII
Letras Gregas . . . . .	VII
Letras românicas várias . . . . .	IX
Siglas . . . . .	XI
Notação . . . . .	XII
Tipos de Letra . . . . .	XII
Distinções . . . . .	XII
Estruturas Lógicas . . . . .	XII
Dificuldade prática . . . . .	XIII
Material Adicional – CD . . . . .	XIII
PREFÁCIO	XVIII

1	INTRODUÇÃO	1
1.1	A energia de Orientação	6
1.1.1	O campo molecular	10
1.1.2	Singularidades no campo do director	12
1.2	Equações de Ericksen-Leslie	13
1.2.1	Apresentação das equações da nematodinâmica	13
1.2.1.1	Notação indicial	13
1.2.1.2	Notação matricial	15
1.2.2	Outros aspectos	17
1.2.2.1	Viscosidades experimentais	17
1.2.2.2	Relação de Parodi	18
1.3	Enquadramento	18
2	MODELOS ESTÁTICOS	21
2.1	Introdução às Transições de Fréedericksz	21
2.2	Transições de Fréedericksz Homogéneas	22
2.2.1	O campo crítico na geometria de torção pura	22
2.2.2	O método clássico	27
2.2.3	Além do campo crítico	29
2.2.4	Geometrias intermédias	30
2.2.5	Outros tipos de transições de Fréedericksz	31
2.2.6	O método utilizado	32
2.3	Transições de Fréedericksz Periódicas	36
2.3.1	Geometria de afunilamento puro	36
2.3.2	Geometria de torção pura	38
2.3.3	Geometria de flexão pura	40
2.3.4	Tipos de transições	40
2.3.5	Tipos de pontos críticos	43
2.3.6	O método utilizado em detalhe	45

2.3.7	Geometria de Afunilamento-Torção . . . . .	48
2.3.8	Geometria de Afunilamento-Flexão . . . . .	52
2.3.9	Geometria de Torção-Flexão . . . . .	57
3	MODELOS DINÂMICOS . . . . .	64
3.1	Viscosidades . . . . .	64
3.2	Equações da nematodinâmica para situações particulares de interesse neste trabalho . . . . .	66
3.3	Reorientação homogénea . . . . .	70
3.4	Tempos longos . . . . .	73
3.5	Nematodinâmica Linear . . . . .	75
3.6	Referencial local . . . . .	77
3.7	O nosso modelo . . . . .	79
4	MEDIDAS . . . . .	83
4.1	Montagem experimental . . . . .	83
4.2	Procedimento experimental . . . . .	87
4.3	Observações preliminares . . . . .	89
4.4	Resultados . . . . .	95
4.4.1	Procedimento experimental não-laboratorial . . . . .	95
4.4.2	Resultados relativos ao vector de onda e ao tempo . . . . .	96
4.4.3	Resultados relativos à inclinação das bandas . . . . .	100
4.5	Análise dos resultados . . . . .	102
5	CONCLUSÕES . . . . .	109
	PERSPECTIVAS . . . . .	111
	Desenvolvimentos . . . . .	112
	Instrumentos teóricos . . . . .	112
	Instrumentos experimentais . . . . .	113

A	CD	114
A.1	Código-fonte . . . . .	114
A.2	Codificação dos nomes dos ficheiros de dados experimentais . . . . .	115
B	FILTROS DE SAVITZKY-GOLAY	117
C	CALIBRAÇÃO DO ELECTROMAGNETO	119
D	TRANSFORMADAS DE HOUGH	122
E	AMOSTRAS	124
F	SISTEMA GAUSSIANO DE UNIDADES	128
G	CITAÇÕES LATINAS	131
H	ARTIGOS PUBLICADOS	133
	BIBLIOGRAFIA	143
	ÍNDICE	152

# PREFÁCIO

Esta é uma dissertação no ramo da Engenharia Física, especialidade de Física Aplicada, e na área afim da Física da Matéria Condensada Mole, mais precisamente, na Física dos Cristais Líquidos Nemáticos. Os sistemas modelo são células nemáticas planares. São estudadas as instabilidades de configuração. A importância deste estudo decorre do actual crescimento da indústria dos monitores e mostradores a cristal líquido e completa-se na investigação fundamental das instabilidades em fluidos complexos, da morfogénese, do *micropatterning*, etc. Esta dissertação encontra-se organizada em duas partes: a primeira parte trata do estudo por simulação numérica das instabilidades e a segunda parte trata de um estudo experimental das instabilidades, para o qual foi necessário desenvolver e implementar uma nova montagem.

## CAPÍTULO 1

Tipos de distorções do campo do director nemático; elasticidade de curvatura; singularidades no campo do director; energia livre de Frank; equações da nematodinâmica.

## CAPÍTULO 2

Campos críticos das transições de Fréedericksz em diversas geometrias; resultados dos artigos [11, 32].

## CAPÍTULO 3

Teoria da nematodinâmica magnética em células planares na geometria de torção.

## CAPÍTULO 4

Estudo experimental.

## CAPÍTULO 5

Conclusões.

# CAPÍTULO 1

## INTRODUÇÃO

*Ab Jove principium*

Os cristais líquidos (CL) são substâncias que exibem em simultâneo as seguintes características:

- Propriedades ópticas normalmente associadas aos cristais; e
- Propriedades reológicas normalmente associadas aos líquidos.

Por outro lado, estas substâncias constituem fases intermédias (mesofases) entre uma fase líquida isotrópica e uma fase sólida cristalina. Nas mesofases termotrópicas as mudanças de fase são induzidas por variação de temperatura e nas liotrópicas são induzidas por variação da concentração de solvente [20]. Nas experiências descritas em §4 foram usados apenas cristais líquidos termotrópicos. Os cristais líquidos são, em geral, substâncias constituídas por moléculas anisométricas, ou seja, de forma bastante diferente de uma esfera. Em primeira aproximação “diferente de uma esfera” quer dizer “elipsóide de revolução”. Ora os elipsóides são orientáveis. Portanto, quando se pretende descrever um cristal líquido como um meio contínuo faz-se corresponder a cada elemento de volume uma orientação e um parâmetro de ordem:

### ORIENTAÇÃO

A orientação define-se por um vector adimensional de módulo unitário denominado director ( $\vec{n}$ ) que corresponde à orientação média das moléculas no elemento de



volume. Devido às razões descritas na página 3 não explicitamos a correspondência entre  $\vec{n}$  e a orientação de cada molécula. Isso implicaria relacionar as propriedades macroscópicas com as microscópicas.

#### PARÂMETRO DE ORDEM

No caso mais simples, define-se o parâmetro de ordem escalar

$$S = \langle P_2(\cos v) \rangle \quad (1.1)$$

em que  $P_2(x)$  é o segundo polinómio de Legendre com a fórmula

$$P_2(x) = \frac{3x^2 - 1}{2} \quad (1.2)$$

e  $v$  é o ângulo entre  $\vec{n}$  e a orientação instantânea de uma molécula. Os parêntesis “ $\langle \rangle$ ” denotam uma média sobre o conjunto das moléculas no elemento de volume. Assim, teremos  $S = 1$  quando todas as moléculas do elemento de volume tiverem a orientação  $\vec{n}$  e teremos  $S = 0$  quando todas as orientações estão igualmente representadas no elemento de volume. Esta última situação corresponde a um meio isotropo.

No caso em que, em vez de elipsóides de revolução, as moléculas são parecidas com elipsóides com todos os eixos diferentes, não basta um único parâmetro de ordem escalar. Nesse caso considera-se um parâmetro de ordem tensorial  $\vec{Q}$  [20, 85]. Mesmo assim, apenas quantificamos alguns aspectos da forma da distribuição de orientações. A *ordem* é uma composição de:

- Ordem orientacional;
- Ordem orientacional de ligação e
- Ordem posicional.

A ordem orientacional de ligação resulta de se propagar a longa distância a direcção definida por pares de moléculas vizinhas. Do ponto de vista das teorias de meios contínuos a ordem posicional não é considerada, pois a cada ponto do espaço corresponde um

elemento de volume e não uma partícula ou molécula. Do ponto de vista das teorias moleculares, nos cristais líquidos a ordem posicional pode estar completamente ausente ou ser menor que a de um sólido cristalino. Os cristais líquidos que apenas apresentam ordem orientacional a longa distância são denominados nemáticos (N). Os nemáticos cuja orientação das moléculas pode ser definida por um único vector são denominados uniaxiais ( $N_u$ ). Se forem necessários dois vectores para definir a orientação das moléculas então o nemático é biaxial ( $N_b$ ). As teorias, técnicas e resultados apresentados nesta tese consideram-se válidos apenas para nemáticos uniaxiais não quirais.

Os nemáticos quirais ( $N^*$ ) são constituídos por moléculas quirais e, por consequência, o seu campo do director encontra-se espontaneamente torcido.

Os cristais líquidos constituídos por moléculas alongadas (em forma de bastonete) podem apresentar, para além da mesofase nemática, mesofases esmélicas em que as moléculas se organizam em camadas. Destas mesofases, a de mais elevada simetria é a esmélica A (SmA, na figura 1.1). Quando as moléculas constituintes são em forma de disco, para além da mesofase nemática podem encontrar-se mesofases colunares. A referência [40] lista os diversos tipos de cristais líquidos e a sua nomenclatura.

Vamos estudar casos particulares da resposta de nemáticos a campos magnéticos. Dado que, para este tipo de interacções:

- A energia envolvida por molécula é pequena quando comparada com a interacção molecular; e
- As distâncias características são grandes quando comparadas com as dimensões moleculares,

efectuamos o nosso estudo no âmbito da mecânica dos meios contínuos. Consideraremos a massa específica  $\rho$  constante e uniforme embora diversos tipos de cristais líquidos possuam  $\rho$  periódico no espaço.

Introduções mais completas e outros detalhes da física dos cristais líquidos podem ser encontrados em [13, 17, 20, 85].

Os cristais líquidos sempre se prestaram às mais diversas analogias:

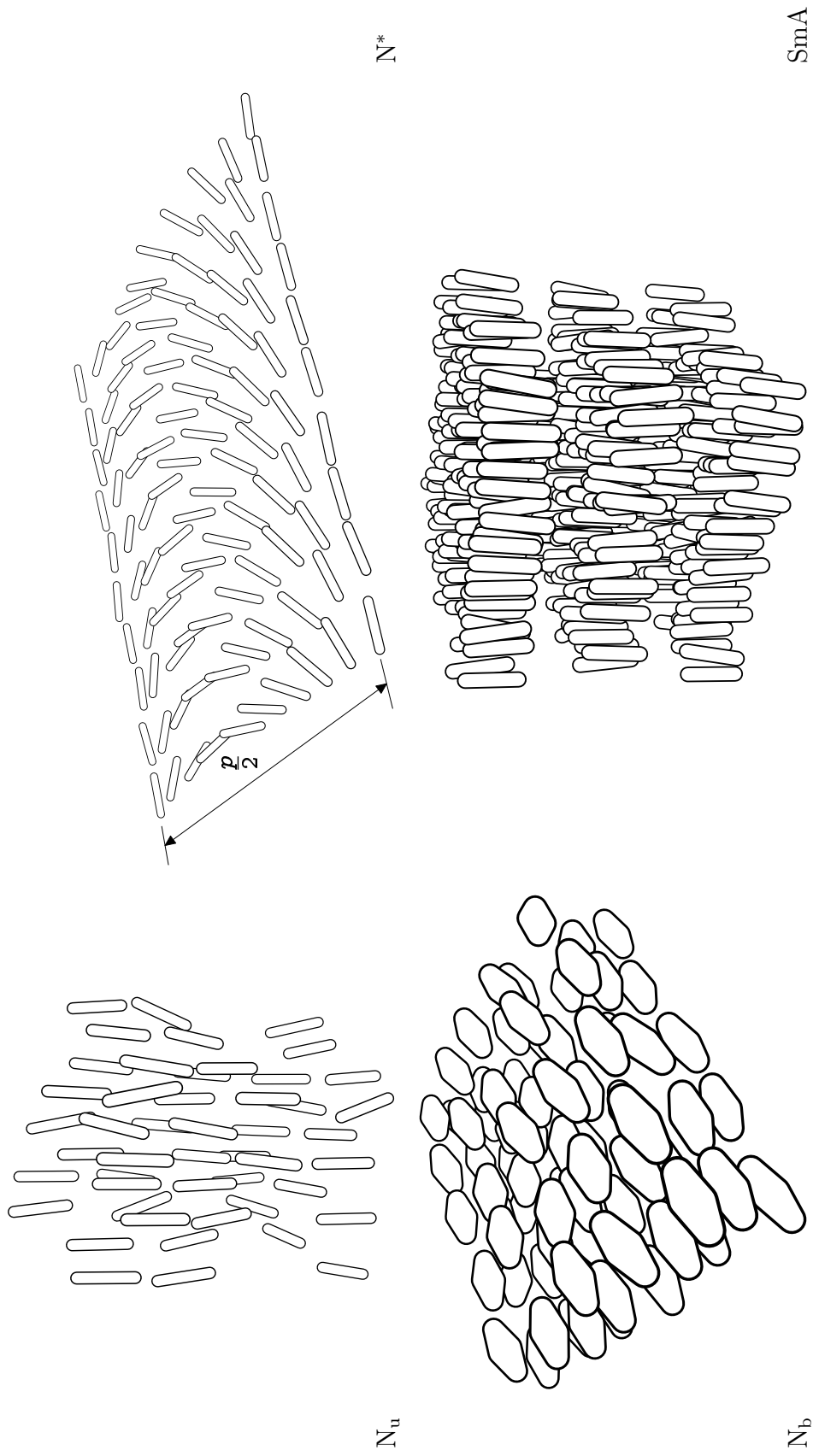


Figura 1.1: Representação esquemática da organização molecular nos cristais líquidos dos tipos: ( $N_u$ ) nemático uniaxial; ( $N^*$ ) nemático quiral; ( $N_b$ ) nemático biaxial; e (SmA) esméctico A. O esquema relativo ao nemático quiral inclui a medição da do passo  $p$  da sua hélice de torção.

## SUPERCONDUTORES

De Gennes [21] estabeleceu a analogia entre a transição de fase N-SmA e a transição de fase condutor-supercondutor.

## SUPERCORDAS

As disclinações encontradas nas fases nemáticas são análogas às supercordas e constituem um meio para o estudo das mesmas [84].

## SOLITÕES

O comportamento de certos defeitos no campo do director sob a acção de um campo magnético é de tipo solitónico e análogo ao de solitões que ocorrem em Hélio superfluido, materiais antiferromagnéticos, etc [13, §3.5.8],[3].

## BIOLOGIA

Esta é a área onde mais cedo e mais frequentemente foram encontradas analogias com os cristais líquidos. Na verdade, muitos dos primeiros estudos dos cristais líquidos eram estudos biológicos [53, 76]. Mais recentemente temos a elasticidade de agregados celulares [45, 54], a forma dos glóbulos vermelhos no sangue [70], a formação de padrões [18, 26], etc.

## DISTORÇÕES EM NEMÁTICOS

As distorções do campo do director induzidas por campos externos possuem aspectos análogos às distorções induzidas por escoamento [24].

Devido a toda esta panóplia de conhecimento interdisciplinar e devido à espantosa diversidade de formas e fenómenos associados aos cristais líquidos, estes mantêm-se ainda capazes de proporcionar novas inspirações para o entendimento da Física e da Vida.

Em conclusão, assumiremos

- Teorias de meios contínuos.
- Massa específica constante e uniforme.
- Cristais líquidos nemáticos uniaxiais não quirais.

## 1.1 A ENERGIA DE ORIENTAÇÃO

Uma das diferenças entre um nemático e um sólido elástico, ou entre um nemático e um líquido isotrópico consiste no facto de distorções (a longa distância) da orientação do director originarem uma “elasticidade de curvatura” que desempenha um papel fundamental nas propriedades deste tipo de materiais, enquanto que num sólido elástico a elasticidade de curvatura é desprezável em face da elasticidade de posição e num líquido isotrópico ela é nula.

A teoria hidrostática de Frank [34, 66, 78] dá a densidade de energia livre de deformação (elasticidade de curvatura) dependente das constantes  $K_1$  (afunilamento)  $K_2$  (torção),  $K_3$  (flexão) e  $K_4$  (sela). Estas constantes medem a rigidez de nemáticos uniaxiais relativamente a distorções dos tipos representados na figura 1.2. Os termos que contribuem para a densidade de energia livre de orientação  $f$ , são originados por:

### CURVATURA DE AFUNILAMENTO

$$f_1 = +\frac{1}{2}K_1(\operatorname{div} \vec{n})^2 \quad (1.3)$$

Existe afunilamento quando uma componente de  $\vec{n}$  numa direcção perpendicular ao director varia nessa mesma direcção.

### CURVATURA DE TORÇÃO

$$f_2 = +\frac{1}{2}K_2(\vec{n} \cdot \operatorname{rot} \vec{n})^2 \quad (1.4)$$

Existe torção quando uma componente de  $\vec{n}$  numa direcção perpendicular ao director varia noutra direcção perpendicular ao director e que também é perpendicular à direcção dessa componente. Se, nessa condição, as linhas de campo do director forem rectas paralelas em planos paralelos a torção é pura.

### CURVATURA DE FLEXÃO

$$f_3 = +\frac{1}{2}K_3(\vec{n} \times \operatorname{rot} \vec{n})^2 \quad (1.5)$$

Existe flexão quando a componente de  $\vec{n}$  na direcção paralela ao director varia nessa mesma direcção. Se as linhas de campo director forem curvas planas paralelas a flexão é pura [69, §29].

#### CURVATURA EM SELA

$$f_s = -(K_2 + K_4) \operatorname{div} (\vec{n} \operatorname{div} \vec{n} + \vec{n} \times \operatorname{rot} \vec{n}) \quad (1.6)$$

Existe curvatura em sela quando o director afunila num plano e diverge no plano perpendicular ao primeiro. Quando o director está distorcido em sela também está simplesmente torcido.

#### CAMPO MAGNÉTICO

$$f_m = -\frac{1}{2} \chi_a (\vec{n} \cdot \vec{H})^2 \quad (1.7)$$

em que  $\chi_a$  é a anisotropia da susceptibilidade magnética (§F).

A densidade de energia livre elástica e magnética, é:

$$f = f_1 + f_2 + f_3 + f_s + f_m \quad (1.8)$$

Esta expressão é válida para pequenos desvios do alinhamento uniforme, nas seguintes condições:

- Sistema Gaussiano de Unidades (§F).
- O director é um vector unitário adimensional, ou seja,  $\vec{n}^2 = 1$ .
- O parâmetro de ordem uniaxial  $S$  é uniforme.
- A densidade de energia é invariante para rotações do director de  $\pi$  rad, ou seja,  $\vec{n} \equiv -\vec{n}$ .
- São irrelevantes os termos independentes de  $\vec{n}$ .
- São desprezáveis as derivadas espaciais de segunda ordem do director. Esta condição pode parecer incompatível com a existência do termo relativo à curvatura em sela, já que este termo contém derivadas de segunda ordem. Tal incompatibilidade

não existe porque

$$\begin{aligned}
& \operatorname{div}(\vec{n} \operatorname{div} \vec{n} + \vec{n} \times \operatorname{rot} \vec{n}) \\
&= \partial_i(n_i n_{k,k} - n_k n_{i,k}) \\
&= n_{i,i} n_{k,k} + n_i n_{k,ki} - n_{k,i} n_{i,k} - n_k n_{i,ki} \\
&= n_{i,i} n_{k,k} - n_{k,i} n_{i,k}
\end{aligned} \tag{1.9}$$

a soma dos termos com derivadas de segunda ordem é nula.

Nestas condições a densidade média de energia livre num dado volume  $\Omega$  é

$$F = \frac{1}{\Omega} \int_{\Omega} (f_1 + f_2 + f_3 + f_s + f_m) d\Omega \tag{1.10}$$

Aplicando o teorema de Gauss ao termo da curvatura em sela obtemos

$$\begin{aligned}
F_s &= - \frac{(K_2 + K_4)}{\Omega} \int_{\Omega} \operatorname{div}(\vec{n} \operatorname{div} \vec{n} + \vec{n} \times \operatorname{rot} \vec{n}) d\Omega \\
&= - \frac{(K_2 + K_4)}{\Omega} \int_{S_{\Omega}} (\vec{n} \operatorname{div} \vec{n} + \vec{n} \times \operatorname{rot} \vec{n}) \cdot \hat{u} dS_{\Omega}
\end{aligned} \tag{1.11}$$

Este termo é, em geral, desprezado com base no argumento de que  $F_s$ , sendo um integral de superfície, dá uma contribuição muito pequena para o integral de volume  $F$ . No entanto, não é necessário desprezar o termo da curvatura em sela quando a superfície fronteira  $S_{\Omega}$  é “plana” e  $\vec{n}$  é uniforme nas fronteiras. O termo da curvatura em sela é identicamente nulo quando  $\vec{n}$  só depende de uma coordenada [4, §2.6]. Nestas condições tem-se

$$(\vec{n} \operatorname{div} \vec{n} + \vec{n} \times \operatorname{rot} \vec{n}) \cdot \hat{u} = 0 \tag{1.12}$$

e, portanto, a contribuição de  $F_s$  é, de facto, nula. Como os sistemas que vamos estudar obedecem a este critério, podemos, então, reescrever a expressão da densidade de energia de orientação na forma que utilizaremos até ao fim.

$$f = f_1 + f_2 + f_3 + f_m \tag{1.13}$$

Por outro lado, se se considerar um campo magnético uniforme

$$\vec{H} = H \hat{h} \tag{1.14}$$

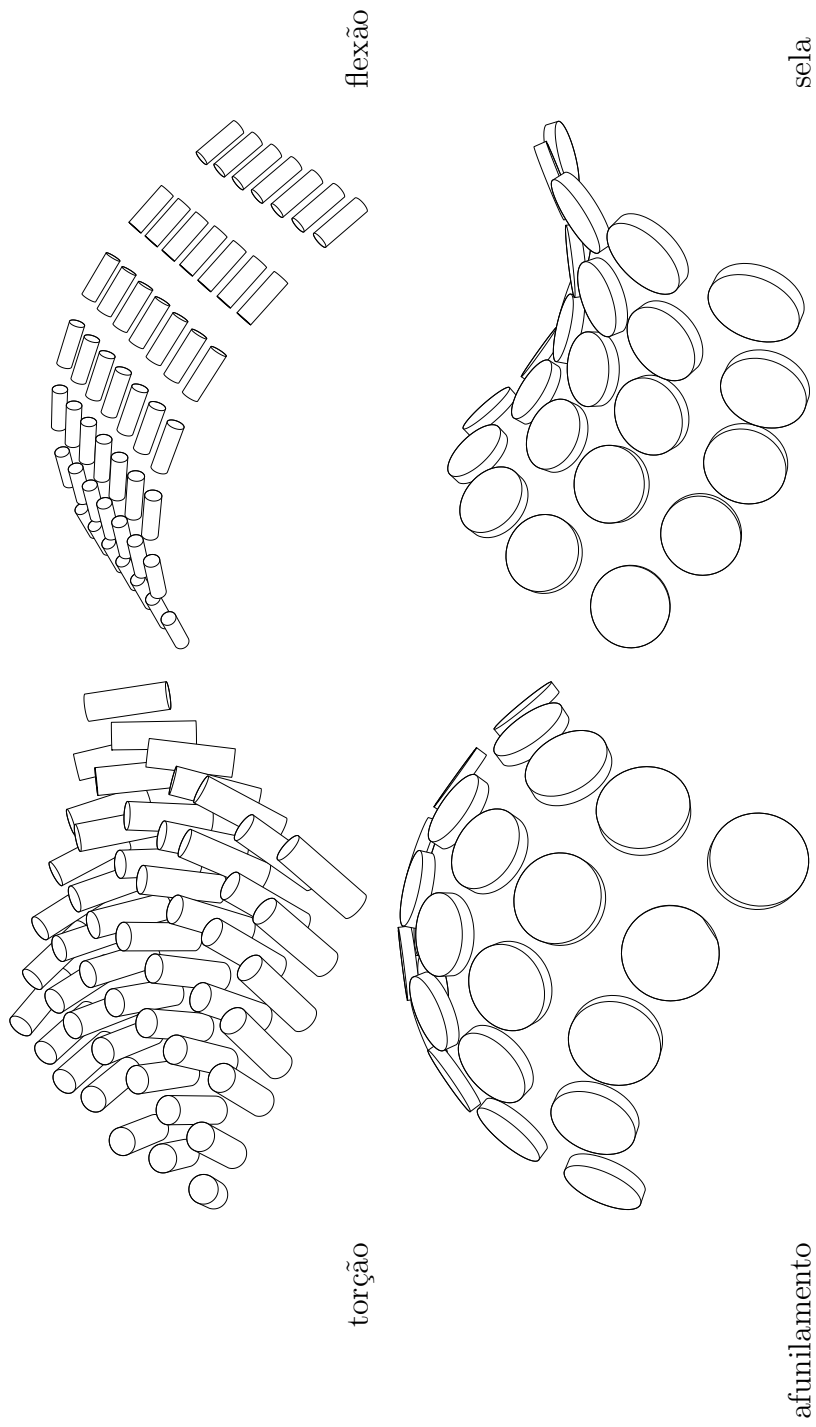


Figura 1.2: Representação esquemática dos quatro tipos de distorção do campo do director. O director é representado como um cilindro ou como um disco. A torção também pode ser representada tal como na figura 1.1 se representa um nemático quiral, no entanto, preferimos a representação de [78] pois é mais próxima do que foi obtido no casos estudados (ver figura 2.10).



ficamos com

$$\begin{aligned}
F_m &= -\frac{\chi_a H^2}{2\Omega} \int_{\Omega} (\vec{n} \cdot \hat{h})^2 d\Omega \\
&= -\frac{\chi_a H^2}{2\Omega} \int_{\Omega} \cos^2 \vartheta d\Omega \\
&= -\frac{\chi_a H^2}{4\Omega} \left( \Omega + \int_{\Omega} \cos(2\vartheta) d\Omega \right)
\end{aligned} \tag{1.15}$$

onde  $\vartheta$  é o ângulo entre o campo magnético e o director e onde recorreremos à relação trigonométrica

$$2 \cos^2 x = 1 + \cos(2x) \tag{1.16}$$

Como não é necessário considerar termos independentes de  $\vec{n}$ , obtemos

$$F_m = -\frac{\chi_a H^2}{4\Omega} \int_{\Omega} \cos(2\vartheta) d\Omega \tag{1.17}$$

donde se verifica que, se  $\chi_a > 0$ , o binário magnético sobre o director é máximo para  $\vartheta = \pi/4$  rad e nulo para  $\vartheta = 0$  e  $\vartheta = \pi/2$  rad. Ainda se  $\chi_a > 0$  a energia magnética é mínima quando  $\vartheta = 0$ , ou seja, quando o director se orienta paralela ou anti-paralelamente ao campo. Se  $\chi_a < 0$  a energia magnética é mínima quando  $\vartheta = \pi/2$  rad, ou seja, quando o director se orienta perpendicularmente ao campo.

Finalmente, estamos em condições de escrever a expressão da densidade média de energia livre de orientação num nemático sujeito a um campo magnético uniforme.

$$\begin{aligned}
F &= +\frac{K_1}{2\Omega} \int_{\Omega} (\text{div } \vec{n})^2 d\Omega \\
&\quad +\frac{K_2}{2\Omega} \int_{\Omega} (\vec{n} \cdot \text{rot } \vec{n})^2 d\Omega \\
&\quad +\frac{K_3}{2\Omega} \int_{\Omega} (\vec{n} \times \text{rot } \vec{n})^2 d\Omega \\
&\quad -\frac{\chi_a H^2}{4\Omega} \int_{\Omega} \cos(2\vartheta) d\Omega
\end{aligned} \tag{1.18}$$

### 1.1.1 O CAMPO MOLECULAR

De Gennes [20] designou por campo molecular o campo vectorial que define a direcção do director que minimiza a energia livre (integral volúmico da densidade de energia).

Encontrar a configuração do director que minimiza a energia consiste em resolver uma das seguintes equações diferenciais

$$\vec{\mathcal{H}} = \zeta \vec{n} \quad \text{ou} \quad \vec{\mathcal{H}} \times \vec{n} = 0 \quad (1.19)$$

em que  $\zeta$  é um multiplicador de Lagrange que surge devido ao constrangimento

$$\vec{n}^2 = 1 \quad (1.20)$$

e o campo molecular é

$$\mathcal{H}_i = -\frac{\partial f}{\partial n_i} + \partial_j \left( \frac{\partial f}{\partial (\partial_j n_i)} \right) \quad (1.21)$$

No caso da densidade de energia livre ser dada por (1.13), tem-se [20]

$$\begin{aligned} \vec{\mathcal{H}} = & K_1 \text{lap } \vec{n} \\ & -K_2 [\mathcal{J} \text{rot } \vec{n} + \text{rot}(\mathcal{J}\vec{n})] \\ & +K_3 \left[ \vec{\mathcal{L}} \times \text{rot } \vec{n} + \text{rot}(\vec{n} \times \vec{\mathcal{L}}) \right] \\ & +\chi_a (\vec{n} \cdot \vec{H}) \vec{H} \end{aligned} \quad (1.22)$$

onde

$$\mathcal{J} = \vec{n} \cdot \text{rot } \vec{n}, \quad \vec{\mathcal{L}} = \vec{n} \times \text{rot } \vec{n} \quad (1.23)$$

A propósito da dedução das equações do campo molecular ver [19]. Os problemas postos pela resolução de (1.19) levam à introdução de métodos aproximados alternativos para a determinação do campo do director minimizante da energia livre, como se verá mais à frente.

### 1.1.2 SINGULARIDADES NO CAMPO DO DIRECTOR

A análise teórica por nós realizada não admite defeitos pontuais nem lineares no campo do director. Considere-se, por exemplo, o seguinte campo do director

$$\begin{cases} n_x(x, y) = \frac{x}{\sqrt{x^2 + y^2}} \\ n_y(x, y) = \frac{y}{\sqrt{x^2 + y^2}} \\ n_z(x, y) = 0 \end{cases} \quad (1.24)$$

Desta forma o director não está definido na origem. Esta configuração corresponde a uma secção transversal de uma disclinação de força  $\mathcal{S} = 1$ . Uma disclinação é uma linha sobre a qual o director não está definido. Trata-se de um defeito linear do campo do director. Também existem defeitos pontuais e planares [20, §4], no entanto, os defeitos planares constituem apenas regiões de elevada curvatura (ver figura 3.3) não correspondendo a singularidades no campo do director. A força de uma disclinação é o quociente entre o ângulo coberto pelo director num circuito à volta da disclinação e  $2\pi$  rad. Um dos gradientes do director é

$$\frac{\partial n_x}{\partial x} = \frac{y^2}{\left(\sqrt{x^2 + y^2}\right)^3} \quad (1.25)$$

Este gradiente está representado na figura 1.3 para linhas rectas a diferentes distâncias da origem. Como se verifica, o valor do gradiente aumenta significativamente quando nos aproximamos da origem. Com efeito

$$\left. \frac{\partial n_x}{\partial x} \right|_{x=0} = \frac{1}{y} \quad \Rightarrow \quad \lim_{x,y \rightarrow 0} \frac{\partial n_x}{\partial x} = \infty \quad (1.26)$$

Assim, a densidade de energia livre de curvatura do campo do director é muito elevada na vizinhança da origem ou na vizinhança da disclinação. Nestas condições seria de esperar que a ocorrência de defeitos em nemáticos fosse impossível. Na verdade, a grande dificuldade está em evitar a sua ocorrência. Esta aparente contradição resulta de estarmos a considerar uma formulação para a densidade de energia de curvatura que

não admite, à partida, singularidades no campo do director. A nossa análise teórica não inclui, por isso, defeitos nem pontuais nem lineares.

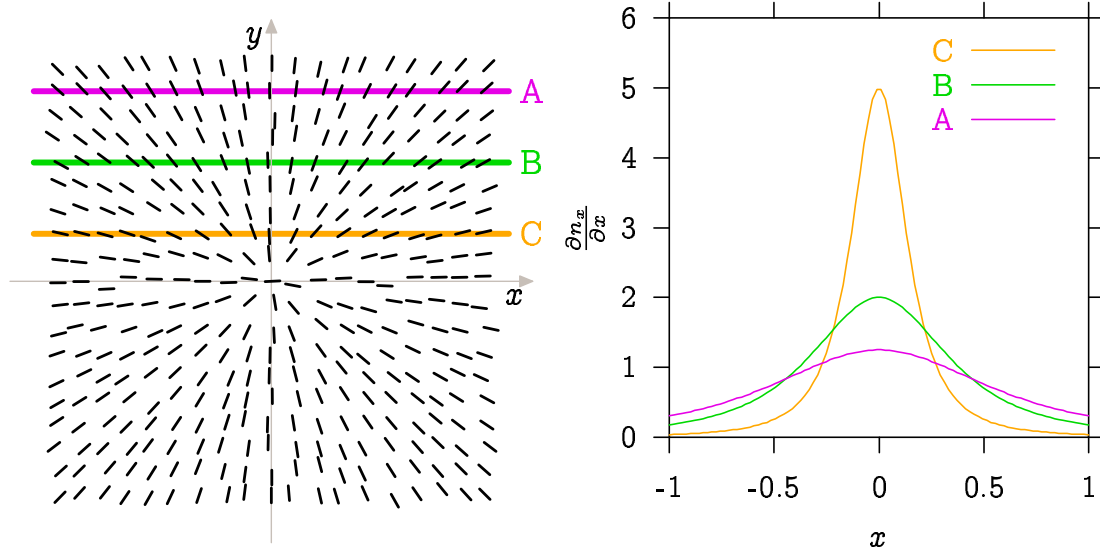


Figura 1.3: Influência de um defeito sobre o gradiente do director. Distâncias em unidades arbitrárias.

## 1.2 EQUAÇÕES DE ERICKSEN-LESLIE

### 1.2.1 APRESENTAÇÃO DAS EQUAÇÕES DA NEMATODINÂMICA

As equações da nematodinâmica, também conhecidas por equações de Ericksen-Leslie (E-L) [28, 29, 57, 58], são apresentadas a seguir na notação indicial. No sentido duma implementação computacional, as mesmas equações são apresentadas logo depois em notação matricial.

#### 1.2.1.1 NOTAÇÃO INDICIAL

As equações hidrodinâmicas de um nemático, de massa específica constante  $\rho$ , a temperatura constante e uniforme, que determinam o campo do director  $\vec{n}(\vec{r}, t)$  e o campo de velocidades  $\vec{v}(\vec{r}, t)$  são as seguintes:

1. Conservação da massa (incompressibilidade)

$$v_{i,i} = 0 \quad (1.27)$$

2. Equação da velocidade (conservação do momento linear)

$$\rho \dot{v}_i = \sigma_{ij,j} \quad (1.28)$$

3. Equação do director (equilíbrio de binários).

$$\rho_1 \ddot{n}_i = g_i + \pi_{ij,j} \quad (1.29)$$

em que  $\rho_1$  é o momento de inércia por unidade de volume.

Outras grandezas relevantes são:

- Tensor dos esforços de orientação:

$$\pi_{ij} = \frac{\partial f}{\partial n_{j,i}} \quad (1.30)$$

- Densidade de força de orientação:

$$g_i = \zeta n_i - \frac{\partial f}{\partial n_i} - \gamma_1 N_i - \gamma_2 n_j A_{ij} \quad (1.31)$$

em que  $\zeta$  é a tensão de orientação. Esta equação permite verificar que  $\gamma_1$  é a viscosidade associada à rotação do director na ausência de fluxo.

As equações correspondentes à conservação do momento angular e à produção de entropia fornecem constrangimentos adicionais mas não alteram as principais conclusões.

A equação (1.27) significa que a divergência da velocidade é nula e impõe um constrangimento ao campo de velocidades assim como (1.20) constrange o campo do director.

O principal componente da equação (1.28) é o tensor dos esforços:

$$\sigma_{ij} = -p\delta_{ij} + \sigma_{ij}^0 + \sigma'_{ij} \quad (1.32)$$

cuja parte elástica é:

$$\sigma_{ij}^0 = -\pi_{ik}n_{k,j} \quad (1.33)$$

e cuja parte viscosa é:

$$\begin{aligned} \sigma'_{ij} = & + \alpha_1 n_k n_p A_{pk} n_j n_i \\ & + \alpha_2 n_i N_j \\ & + \alpha_3 n_j N_i \\ & + \alpha_4 A_{ij} \\ & + \alpha_5 n_i n_k A_{kj} \\ & + \alpha_6 n_j n_k A_{ki} \end{aligned} \quad (1.34)$$

$\vec{N}$  representa uma velocidade de rotação do director relativamente ao fluido circundante.

$$N_i = \dot{n}_i - w_{ik}n_k \quad (1.35)$$

O ponto sobreposto representa uma derivada material em ordem ao tempo. A derivada material de uma grandeza escalar é:

$$\frac{d}{dt} \equiv \frac{\partial}{\partial t} + \vec{v} \cdot \text{grad} \quad (1.36)$$

$w$  é a parte antissimétrica e  $A$  a parte simétrica do tensor dos gradientes de velocidade:

$$D_{ij} = v_{i,j} \quad (1.37)$$

A teoria E-L pressupõe

$$\rightarrow \sigma'_{ji} \text{ linear em } \vec{N} \text{ e } A_{ji}$$

ou seja, pressupõe que  $\vec{N}$  e  $\text{grad}(\vec{v})$  sejam pequenos.

### 1.2.1.2 NOTAÇÃO MATRICIAL

Os vectores são aqui representados por matrizes coluna e os tensores por matrizes quadradas. Mantemos a simbologia de §1.2.1.1. O director é  $[n]$  e a velocidade é  $[v]$ . A

equação (1.36) diz-nos que

$$[\dot{n}] = \frac{\partial}{\partial t}[n] + \text{jac}[n] [v] \quad (1.38)$$

e que

$$[\dot{v}] = \frac{\partial}{\partial t}[v] + \text{jac}[v] [v] \quad (1.39)$$

em que se considera,

$$\text{jac}[v] = \begin{bmatrix} \frac{\partial v_1}{\partial x} & \frac{\partial v_1}{\partial y} & \frac{\partial v_1}{\partial z} \\ \frac{\partial v_2}{\partial x} & \frac{\partial v_2}{\partial y} & \frac{\partial v_2}{\partial z} \\ \frac{\partial v_3}{\partial x} & \frac{\partial v_3}{\partial y} & \frac{\partial v_3}{\partial z} \end{bmatrix} \quad (1.40)$$

o que é o mesmo que, considerando a matriz coluna

$$[\partial] = \begin{bmatrix} \frac{\partial}{\partial x} \\ \frac{\partial}{\partial y} \\ \frac{\partial}{\partial z} \end{bmatrix} \quad (1.41)$$

fazer

$$\text{jac}[v] = [v][\partial]^T \quad (1.42)$$

O tensor dos esforços elásticos é:

$$[\sigma^0] = -[\pi] \text{jac}[n] \quad (1.43)$$

e o dos viscosos é:

$$\begin{aligned} [\sigma'] = & + \alpha_1 [n][n]^T [n]^T [A][n] \\ & + \alpha_2 [N][n]^T \\ & + \alpha_3 [n][N]^T \\ & + \alpha_4 [A] \\ & + \alpha_5 [A][n][n]^T \\ & + \alpha_6 [n] ([A][n])^T \end{aligned} \quad (1.44)$$

Conservação do momento linear

$$\rho[\dot{v}] = [\sigma][\partial] \quad (1.45)$$

Equação do director desprezando termos inerciais

$$[g] + [\pi][\partial] = [0] \quad (1.46)$$

O principal componente da equação (1.28) é o tensor dos esforços:

$$[\sigma] = -p[I] + [\sigma^0] + [\sigma'] \quad (1.47)$$

$[N]$  representa uma velocidade de rotação do director relativamente ao fluido circundante.

$$[N] = [\dot{n}] - [w][n] \quad (1.48)$$

A equação do director (1.29) pode ser escrita da seguinte forma, tendo em conta (1.21), (1.31) e desprezando  $\rho_1 \ddot{n}$

$$\zeta[n] + [\mathcal{H}] - [g'] = [0] \quad (1.49)$$

em que se tem o campo molecular  $[\mathcal{H}]$ , a parte dissipativa da força de orientação:

$$[g'] = \gamma_1[N] + \gamma_2[A][n] \quad (1.50)$$

e a tensão de orientação  $\zeta$ . Repare-se que  $[g']$  constitui o termo de acoplamento entre o director e a velocidade pois não estava incluído em (1.19).

## 1.2.2 OUTROS ASPECTOS

### 1.2.2.1 VISCOSIDADES EXPERIMENTAIS

Em escoamento de cisalhamento simples tem-se a viscosidade aparente

$$\eta = \frac{\sigma_{12}}{2A_{12}} \quad (1.51)$$

considerando escoamento na direcção 1 e gradiente de velocidades na direcção 2. Mi-  
esowicz [64] obteve viscosidades aparentes em função da orientação do director neste  
mesmo escoamento:



- Director na direcção 3

$$\eta_a = \frac{1}{2}\alpha_4 \quad (1.52)$$

- Director na direcção 1

$$\eta_b = \frac{1}{2}(\alpha_3 + \alpha_4 + \alpha_6) \quad (1.53)$$

- Director na direcção 2

$$\eta_c = \frac{1}{2}(\alpha_4 + \alpha_5 - \alpha_2) \quad (1.54)$$

Em escoamento elongacional (tipo água a cair de uma torneira sem gotejar) o director, a velocidade e o gradiente de velocidade têm a mesma direcção  $x$ .

$$\nu_1 = \frac{\sigma_{xx}}{2A_{xx}} = \frac{1}{2}(\alpha_1 + \alpha_4 + \alpha_5 - \alpha_6) \quad (1.55)$$

### 1.2.2.2 RELAÇÃO DE PARODI

Considera-se válida a relação de Parodi [71]

$$\alpha_2 + \alpha_3 = \alpha_6 - \alpha_5 \quad (1.56)$$

e, portanto, existem cinco coeficientes  $\alpha_i$  de viscosidade de Leslie independentes. Considerando a relação de Parodi tem-se

$$\gamma_1 = \alpha_3 - \alpha_2 \quad (1.57)$$

$$\gamma_2 = \alpha_3 + \alpha_2 \quad (1.58)$$

$\gamma_1$  chama-se viscosidade rotacional por quantificar o efeito dissipativo duma rotação do director na ausência de fluxo.

## 1.3 ENQUADRAMENTO

A introdução do tema desta tese ficaria incompleta sem referência aos estudos de temática próxima mas diferente do mesmo. Começamos por referir o lançamento das

bases da teoria de meios contínuos nemáticos em 1933 por Oseen [68] e Zöcher [87], curiosamente no mesmo volume da revista *Transactions of the Faraday Society* em que surge o conceito de transição de Fréedericksz [35] (§2.1). Só em 1958 é que Frank, tendo reexaminado os trabalhos de Oseen, estabeleceu a teoria da elasticidade de curvatura [34]. Por outro lado, Oseen também propôs no já citado artigo [68], uma teoria da nematodinâmica mas só em 1960 é que Ericksen viria a estabelecer uma formulação baseada em leis de conservação [28] e só em 1966 é que Leslie a completaria com equações constitutivas [57]. Outros autores deram, posteriormente, contribuições para o aperfeiçoamento da teoria da elasticidade de curvatura, tais como Saupe [66] e Schmidt [78], e da nematodinâmica, tais como Parodi [71] e Martins [61]. Note-se que o estabelecimento das teorias de meios contínuos nemáticos foi precedido de inúmeras observações experimentais que só mais tarde puderam ser explicadas. Por outro lado, o desenvolvimento de aplicações tecnológicas, tais como os mostradores de cristal líquido, as janelas de transparência controlada e as fibras de alta tenacidade, promoveram um alargado investimento na investigação experimental e teórica dos cristais líquidos. Por exemplo, o conceito de transição de Fréedericksz evoluiu desde a definição original [35]:

Transição de segunda ordem (contínua) na configuração do campo do diretor, por efeito de um campo magnético, numa de três geometrias ortogonais.

até uma ideia genérica de “mudança na configuração de uma substância anisótropa”. Sendo explicada apenas com base na elasticidade de curvatura (1.13) (ver §2), permitiu não só a determinação quantitativa das constantes elásticas de inúmeros materiais mas também o aperfeiçoamento da própria teoria. Nomeadamente, a extensão da teoria de Frank\* para gradientes de segunda ordem levou ao aparecimento de novas constantes elásticas ( $K_{13}$  e  $K^*$ ) e novas polémicas (ver [4]). De maneira mais consensual, foram levados a cabo estudos das transições de Fréedericksz: em geometrias intermédias; em nemáticos quirais; em nemáticos com propriedades magnéticas especiais; em elastómeros; com fronteiras moles; com fronteiras híbridas; com fronteiras onduladas;

---

\*também designada por teoria OZF (Oseen-Zöcher-Frank)

sob o efeito de de campos eléctricos constantes ou alternados; sob o efeito combinado de campos magnético e eléctrico perpendiculares; sob o efeito de campos ópticos [52]; tendo em conta o efeito flexoelectrico; em células planares; em bolhas esféricas; no interior de torus; no interior de materiais porosos; observadas por diversas técnicas; do ponto de vista da estabilidade das configurações; simulando as configurações do campo do director; etc.

O conceito de transição de Fréedericksz suporta, adicionalmente, a formação de instabilidades periódicas (inhomogéneas) tanto do ponto de vista da estática (explicada exclusivamente com a elasticidade de curvatura) [14, 60] como do ponto de vista da dinâmica [59, 63].

A formação de estruturas periódicas em transientes de reorientação do campo do director e/ou em vários tipos de escoamento é um tema vastíssimo [6] no entanto não podemos deixar de realçar o papel desempenhado por Martins não só no desenvolvimento da técnica da *Reo-RMN* [31, 63], que envolve instabilidades magnetodinâmicas análogas às estudadas em §4, mas também na orientação de estudos respectivos [8, 38, 56], na introdução do estudo dos cristais líquidos em Portugal e, em particular, na extensão da nematodinâmica a fluidos não-newtonianos [61].

Na área da formação de estruturas periódicas em transientes de reorientação encontram-se os estudos que tematicamente mais próximos se encontram do que por nós foi levado a cabo em §3 e em §4. Em particular os estudos da dinâmica de reorientação magnética do campo do director na geometria de torção pura e não-pura [44, 72] e os estudos do efeito de uma rotação súbita [27] como em §4.2.

Temáticas que ultrapassam a desta tese, embora na mesma linha, incluem o estudo da formação de padrões em amostras nemáticas sujeitas a campos magnéticos rotativos [62, 73, 74] e incluem estudos da formação, simulação e dinâmica de defeitos como disclinações [3, 15, 22] e paredes [83]. Os campos magnéticos rotativos podem dar origem a estruturas oscilatórias, caóticas e outras.

# CAPÍTULO 2

## MODELOS ESTÁTICOS

*Delenda Cartago*

### 2.1 INTRODUÇÃO ÀS TRANSIÇÕES DE FRÉEDERICKSZ

Considere-se uma célula nemática com condições fronteira tais que o campo do director seja uniforme. Aplique-se-lhe um campo magnético. Quando o efeito orientador das fronteiras compete com o efeito orientador do campo magnético pode surgir uma distorção no campo no director. No caso em que o campo magnético é perpendicular ao campo inicial do director a distorção só se forma se a intensidade do campo magnético ultrapassar um determinado valor crítico. Este é um exemplo de uma transição de Fréedericksz [35].

Torna-se fácil compreender a existência de um valor crítico se se considerar uma pequena perturbação local no campo do director. Esta flutuação sofrerá uma força elástica estabilizadora devido às condições fronteira. Por outro lado, dependendo do sinal de  $\chi_a$ , o campo magnético pode ter um efeito desestabilizador. A intensidade da desestabilização depende da intensidade do campo magnético. Portanto atinge-se o limiar de aparecimento duma distorção em equilíbrio quando a força desestabilizadora

igual a estabilizadora [85], ou seja, quando

$$\chi_a H^2 = K q^2 \quad (2.1)$$

em que  $q = 2\pi/\lambda$  é o vector de onda da flutuação e  $K$  é uma constante elástica que depende da geometria. Note-se que devido à elasticidade de curvatura (1.13) qualquer perturbação do campo do director se estende para além do ponto em que actuou. Como as moléculas se agitam permanentemente (agitação térmica), subjacente ao campo do director existe um campo de orientações moleculares permanentemente percorrido por flutuações.

Neste capítulo consideramos

- $\vec{n}_0 \perp \vec{H}$ .
- Anisotropia da susceptibilidade magnética positiva. O director tende a orientar-se paralela ou anti-paralelamente ao campo magnético.
- Confinamento entre duas placas planas paralelas.
- Condições fronteira rígidas, de Dirichlet ou ancoragem forte característica das mesofases termotrópicas.
- Orientação uniforme do director nas fronteiras.
- Flexoelectricidade desprezável.

## 2.2 TRANSIÇÕES DE FRÉEDERICKSZ HOMOGÉNEAS

### 2.2.1 O CAMPO CRÍTICO NA GEOMETRIA DE TORÇÃO PURA

De acordo com o esquema da figura 2.1 podemos escrever o director nemático como

$$\left\{ \begin{array}{l} n_x(z) = \cos \phi(z) \\ n_y(z) = \sin \phi(z) \\ n_z(z) = 0 \end{array} \right. \quad (2.2)$$

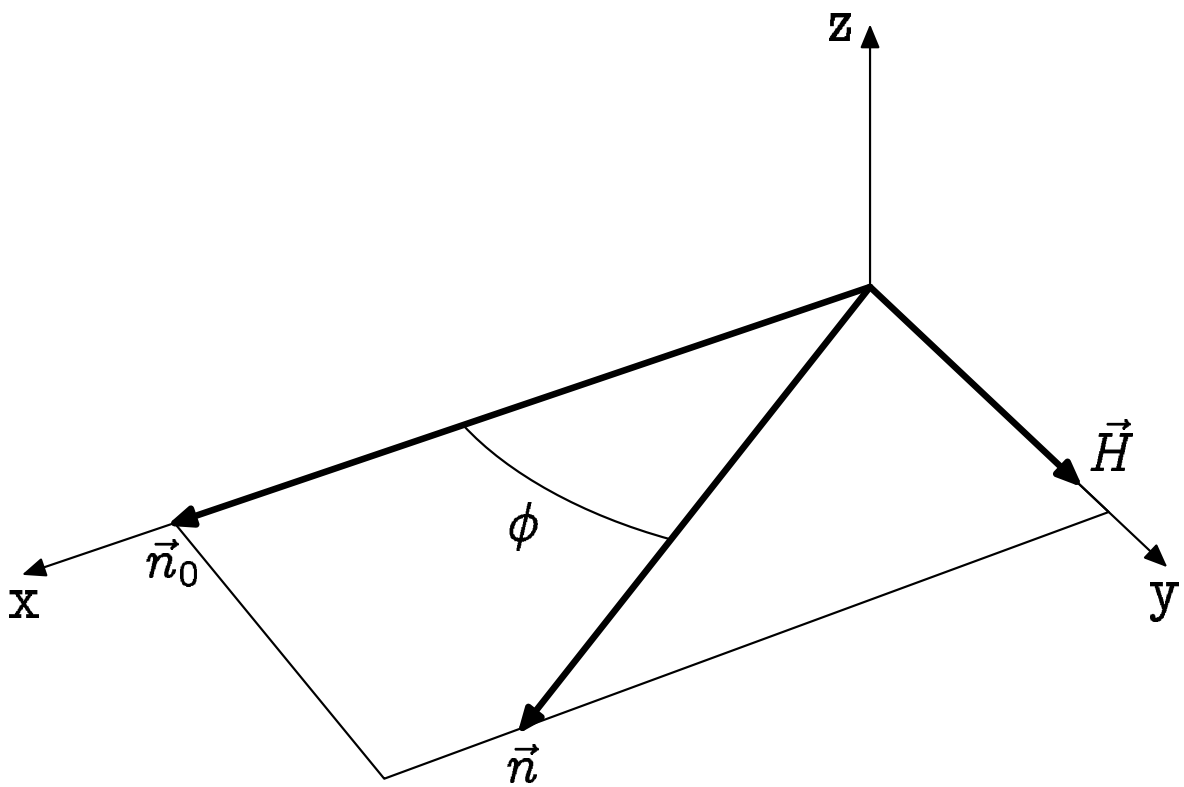


Figura 2.1: Referencial para a transiço de Fredericksz homogenea na geometria de torço pura. Nao estao representadas as fronteiras planas em  $z = \pm d_c/2$ .

e o campo magnético como

$$\begin{cases} H_x = 0 \\ H_y = H \\ H_z = 0 \end{cases} \quad (2.3)$$

Assim podemos simplificar a expressão (1.13) obtendo

$$f_t = \frac{1}{2}K_2 \left( \frac{\partial \phi}{\partial z} \right)^2 - \frac{1}{2}\chi_a H^2 \sin^2 \phi \quad (2.4)$$

e a densidade média de energia de orientação fica

$$F_t = \frac{1}{d_c} \int_{-\frac{d_c}{2}}^{\frac{d_c}{2}} f_t dz \quad (2.5)$$

em que  $d_c$  é a espessura da célula de cristal líquido. Podemos ainda definir a distância reduzida

$$z_r = q_z z \quad (2.6)$$

em que  $q_z = \frac{\pi}{d_c}$  e efectuar a correspondente mudança de variável no integral (2.5). Nesta mudança de variável há que ter em conta que

$$\frac{\partial \phi}{\partial z} = \frac{\pi}{d_c} \frac{\partial \phi}{\partial z_r} \quad (2.7)$$

Assim,

$$F_t = \frac{1}{2\pi} \int_{-\frac{\pi}{2}}^{\frac{\pi}{2}} K_2 \left( \frac{\pi}{d_c} \right)^2 \left( \frac{\partial \phi}{\partial z_r} \right)^2 - \chi_a H^2 \sin^2 \phi dz_r \quad (2.8)$$

A configuração  $\phi(z)$  do campo do director será a que minimiza  $F_t$ . Estamos, por isso, em presença de um problema variacional que poderemos resolver aplicando a equação de Euler-Lagrange que é análoga à definição do campo molecular em (1.21)

$$-\frac{\partial f_t}{\partial \phi} + \frac{d}{dz_r} \left( \frac{\partial f_t}{\partial \left( \frac{\partial \phi}{\partial z_r} \right)} \right) = 0 \quad (2.9)$$

donde, admitindo  $\sin(2\phi) \approx 2\phi$  (válido para pequenas deformações), obtemos

$$\frac{\partial^2 \phi}{\partial z_r^2} + \frac{\chi_a H^2}{K_2 \left(\frac{\pi}{d_c}\right)^2} \phi = 0 \quad (2.10)$$

Esta equação diferencial é análoga à equação do movimento harmónico simples. Tem soluções periódicas. Das soluções que respeitam as condições fronteira

$$\phi(z_r = \pm\pi/2 \text{ rad}) = 0 \quad (2.11)$$

a solução que produz menores gradientes do director, menor densidade de energia e menor  $F_t$  é aquela que possui o menor vector de onda possível

$$\frac{\chi_a H^2}{K_2 \left(\frac{\pi}{d_c}\right)^2} = q^2 = \left(\frac{\pi}{\pi}\right)^2 = 1 \quad (2.12)$$

Agora, estamos em condições de reescrever a equação (2.1)

$$H_t^* = \frac{\pi}{d_c} \sqrt{\frac{K_2}{\chi_a}} \quad (2.13)$$

Este é o campo crítico para a transição de Fréedericksz na geometria de torção pura. No entanto, por razões que se tornarão claras mais à frente, é conveniente introduzir o conceito de força magnética  $\mathcal{M}$ . Damos-lhe este nome por possuir unidades de força.

$$\mathcal{M} = \chi_a H^2 \left(\frac{d_c}{\pi}\right)^2 \quad (2.14)$$

Assim, a força magnética crítica para a transição de Fréedericksz na geometria de torção pura é, simplesmente,

$$\mathcal{M}_t^* = K_2 \quad (2.15)$$

O campo do director fica distorcido como se representa na figura 2.2 para  $\mathcal{M} > \mathcal{M}_t^*$ .

Analogamente, temos para a geometria de afunilamento puro (figura 2.3)

$$\mathcal{M}_a^* = K_1 \quad (2.16)$$

e para a geometria de flexão pura (figura 2.5)

$$\mathcal{M}_f^* = K_3 \quad (2.17)$$



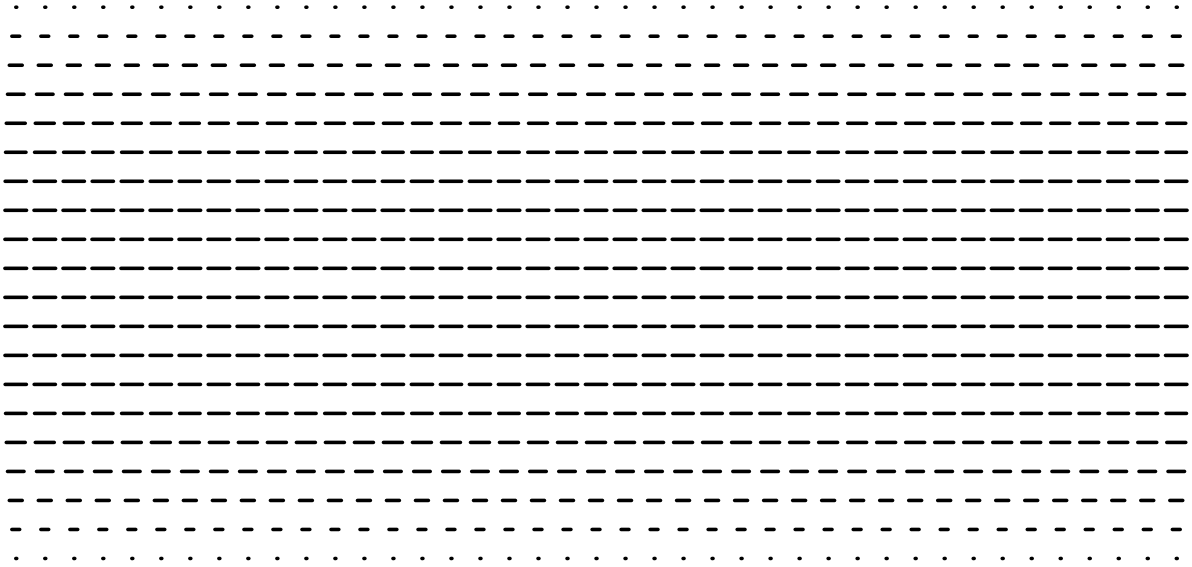


Figura 2.2: Representação do campo do director no plano  $yz$  da figura 2.1 para  $\mathcal{M}$  acima da transição de Fréedericksz homogénea na geometria de torção pura.

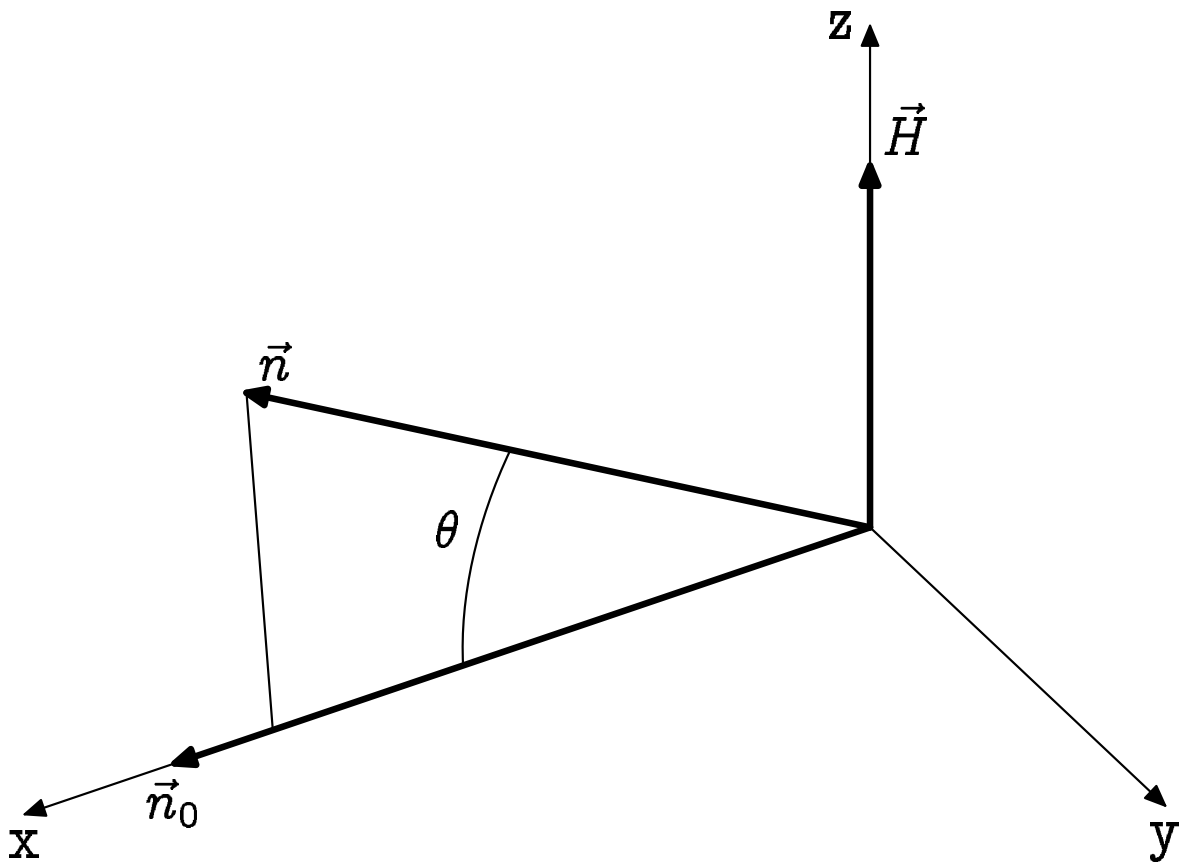


Figura 2.3: Referencial para a transição de Fréedericksz homogénea na geometria de afunilamento puro. Não estão representadas as fronteiras planas em  $z = \pm d_c/2$ .

## 2.2.2 O MÉTODO CLÁSSICO

De maneira geral, o cálculo dos campos críticos das transições de Fréedericksz segue o método que exemplificamos em §2.2.1.

1. Define-se a geometria (referencial, forma e fronteiras do domínio  $\Omega$ ) como na figura 2.1.
2. Define-se a parametrização do campo do director como em (2.2).
3. Define-se a parametrização do campo magnético como em (2.3).
4. Deduzem-se as equações diferenciais do problema, como (2.10). Esta dedução pode ser feita de duas maneiras:
  - Simplesmente através da equação de Euler-Lagrange ou
  - Através do campo molecular (§1.1.1).

Sempre que nos referirmos a “equações diferenciais” são estas que designamos.

5. Seleccionam-se as soluções adequadas.

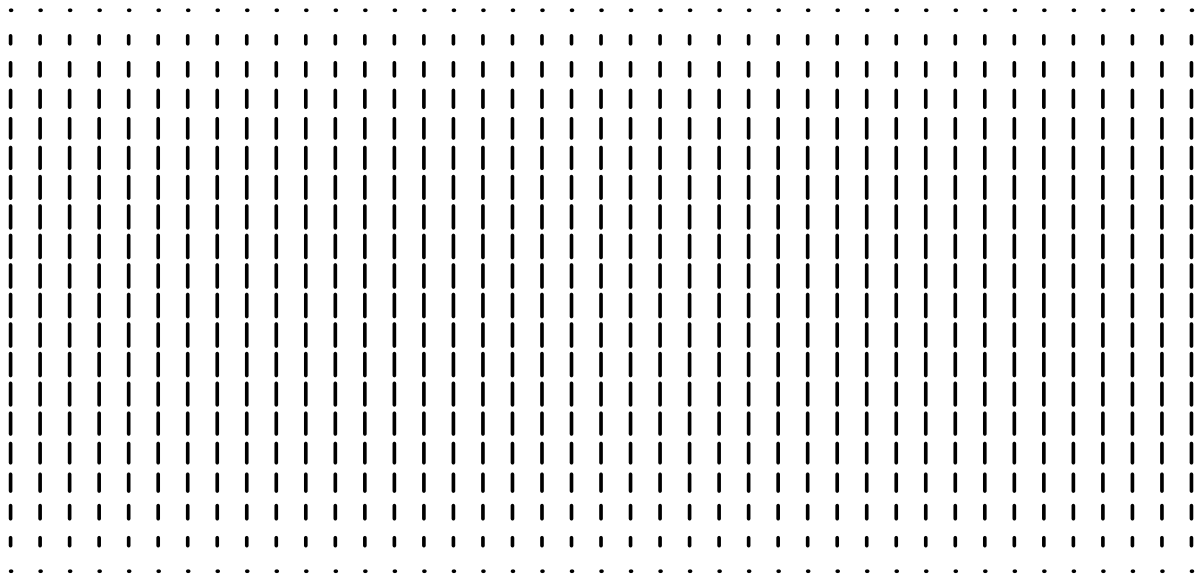


Figura 2.4: Representação do campo do director no plano  $yz$  da figura 2.3 para  $\mathcal{M}$  acima da transição de Fréedericksz homogênea na geometria de afunilamento puro.

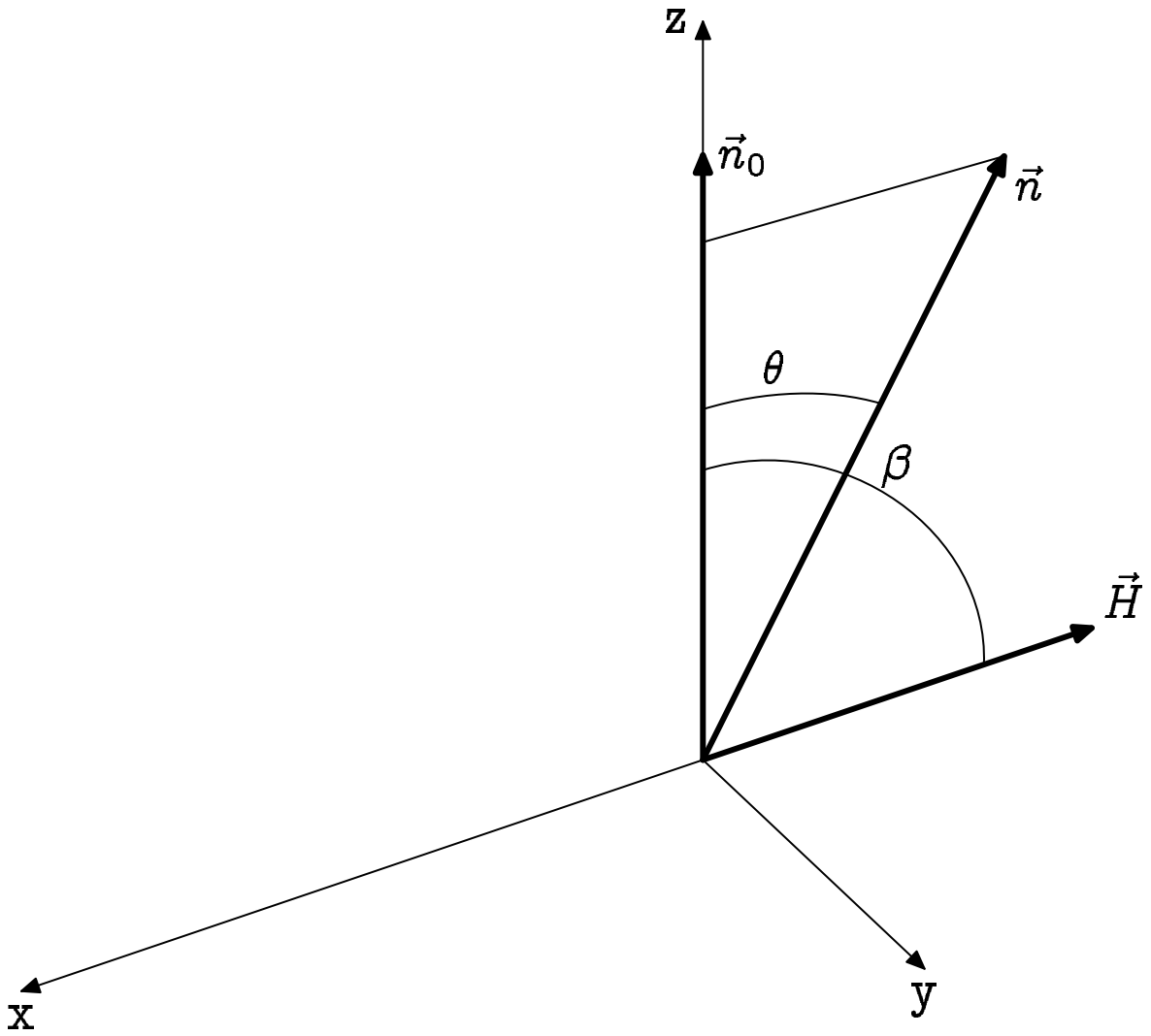


Figura 2.5: Referencial para a transição de Fréedericksz homogénea na geometria de flexão pura. Não estão representadas as fronteiras planas em  $z = \pm d_c/2$ .

### 2.2.3 ALÉM DO CAMPO CRÍTICO

A equação diferencial (2.13) foi obtida no pressuposto de pequenas distorções, o que é suficiente para determinar o valor do campo magnético crítico mas não é suficiente para determinar a configuração do director (definida por  $\phi(z)$  em §2.2.1) a campos bastante superiores ao crítico. A resolução das equações diferenciais do problema *sem aproximações* fornece a configuração do campo do director em função do campo magnético e dos outros parâmetros de controle [79]. No caso da geometria de torção pura, fornece  $\phi(z; H, K_2, \chi_a, d_c)$  ou  $\phi(z; H_r)$  em que

$$H_r = \frac{H}{H^*} \quad (2.18)$$

Quando  $\phi$  é igual em ambas as fronteiras  $\phi(z)$  é uma função par e tem um extremo em  $z = 0$ . A função  $\phi(0; H_r)$  tem um andamento análogo ao da figura 3.4.5 de [13] onde se verifica que quando  $\vec{H}$  e  $\vec{n}_0$  não são perpendiculares também não fica definido um campo crítico. Por outro lado, pode ser definido um campo de saturação a partir do qual a distorção já não aumenta significativamente.

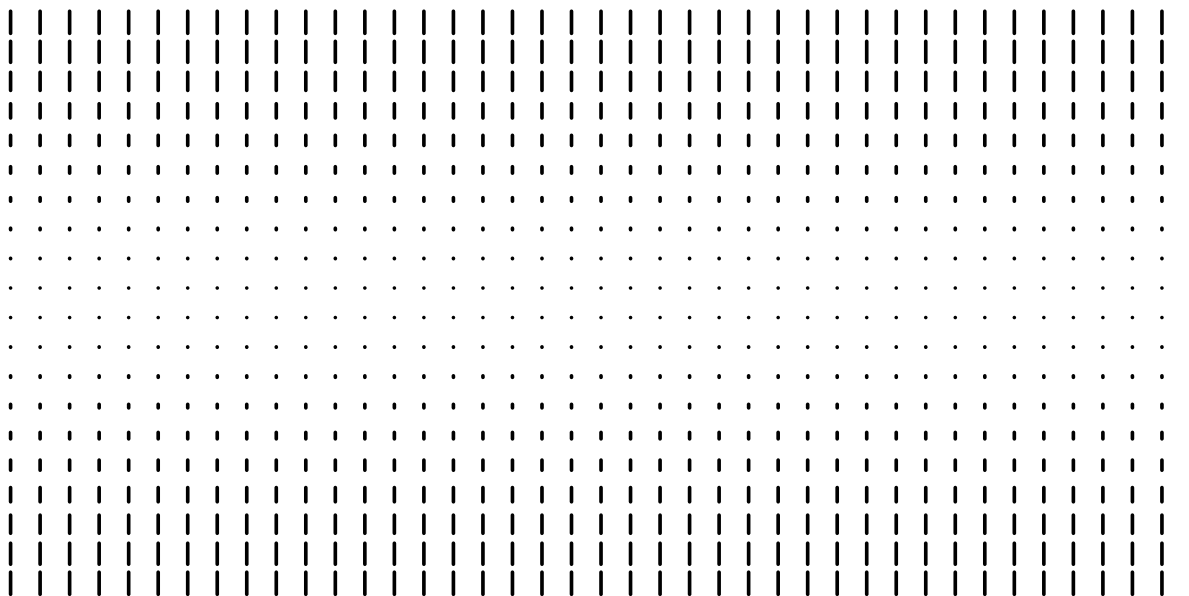


Figura 2.6: Representação do campo do director no plano  $yz$  da figura 2.5 para  $\mathcal{M}$  acima da transição de Fréedericksz homogênea na geometria de flexão pura.

## 2.2.4 GEOMETRIAS INTERMÉDIAS

O método de §2.2.2 já deu origem a um vasto conhecimento, nomeadamente no que diz respeito às geometrias intermédias que, a seguir, caracterizamos com base na figura 2.7.

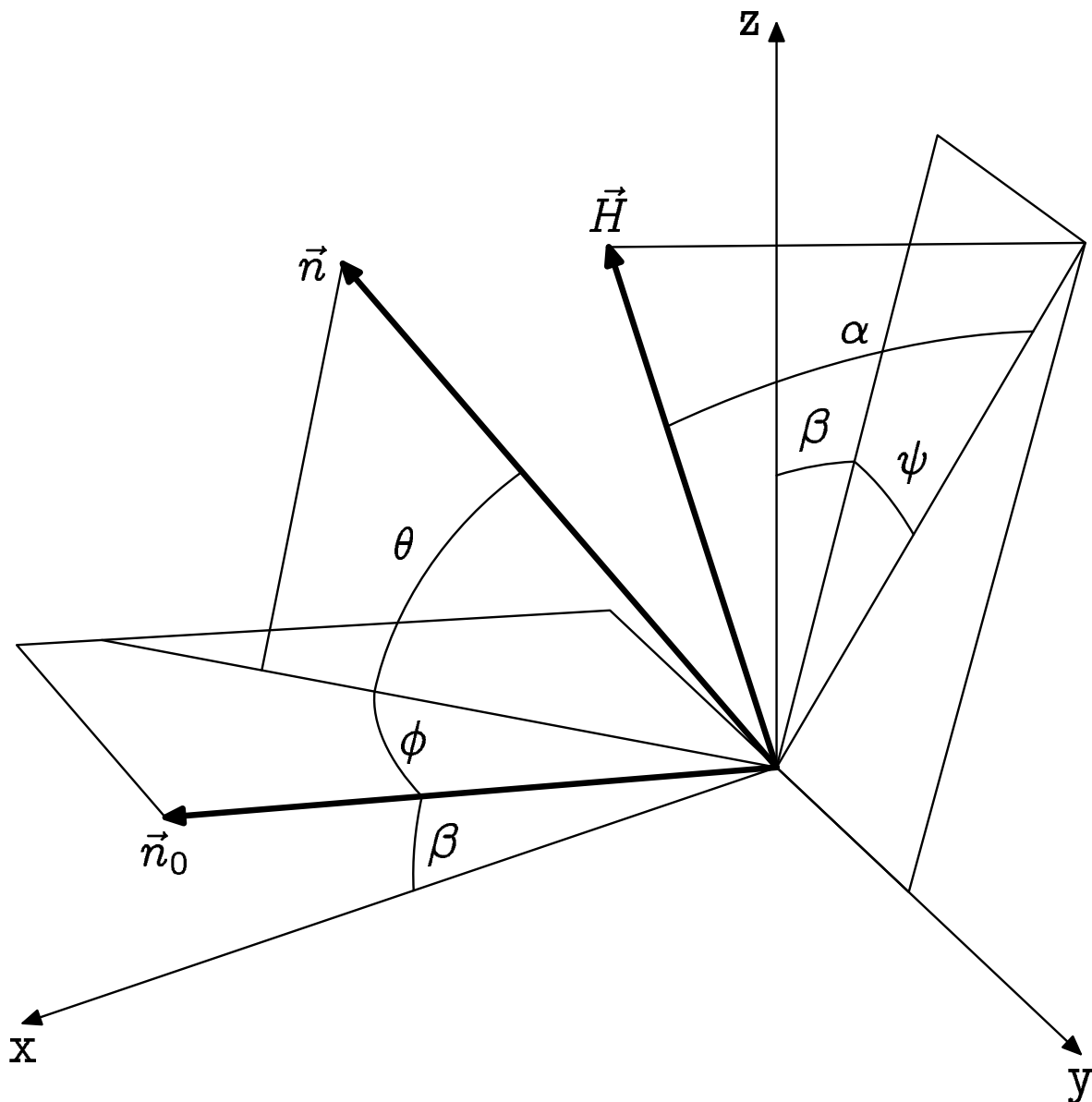


Figura 2.7: Referencial para as transições de Fréedericksz homogêneas nas geometrias intermédias. Não estão representadas as fronteiras planas em  $z = \pm d_c/2$ .

### AFUNILAMENTO-TORÇÃO

Corresponde a ter-se  $\beta = 0$  e  $\psi \in [0; \pi/2]$ . O campo crítico da transição de

Fréedericksz foi determinado por Deuling [25].

$$\mathcal{M}_{at}^* = K_2 [1 + (K_2/K_1 - 1) \cos^2 \psi]^{-1} \quad (2.19)$$

#### AFUNILAMENTO-FLEXÃO

Corresponde a ter-se  $\beta \in [0; \pi/2]$  e  $\psi = 0$ . O campo crítico da transição de Fréedericksz foi determinado por Nehring [65].

$$\mathcal{M}_{af}^* = K_3 [1 + (K_1/K_3 - 1) \cos^2 \beta] \quad (2.20)$$

#### TORÇÃO-FLEXÃO

Corresponde a ter-se  $\beta \in [0; \pi/2]$  e  $\psi = \pi/2$  rad. O campo crítico da transição de Fréedericksz foi determinado por Fischer [33].

$$\mathcal{M}_{tf}^* = K_3 [1 + (K_2/K_3 - 1) \cos^2 \beta] \quad (2.21)$$

Repare-se que se  $\beta = \pi/2$  rad então, independentemente de  $\psi$ , trata-se da geometria de flexão pura. A figura 2.8 esquematiza resumidamente o andamento dos ângulos  $\beta$  e  $\psi$  nas três geometrias intermédias.

### 2.2.5 OUTROS TIPOS DE TRANSIÇÕES DE FRÉEDERICKSZ

Mencionamos brevemente outros tipos de transições de Fréedericksz não periódicas.

#### $\vec{n}_0$ NÃO-UNIFORME

É possível ter, simultaneamente,  $\vec{H}$  uniforme,  $\vec{H} \perp \vec{n}_0$  e  $\vec{n}_0$  não-uniforme. Berreman [5] determinou o campo crítico da transição de Fréedericksz quando o campo magnético é paralelo ao eixo da hélice de um nemático torcido por fronteiras planares.

#### $\chi_a < 0$

Quando a anisotropia da susceptibilidade magnética é negativa o director prefere alinhar-se perpendicularmente ao campo magnético. Greubel [43] determinou o campo crítico da transição de Fréedericksz quando o campo magnético é paralelo ao director ancorado homeotropicamente.

### 2.2.6 O MÉTODO UTILIZADO

As equações diferenciais dos problemas variacionais relacionados com transições de Fréedericksz são, em geral, bastante complexas. No entanto, já foram resolvidas para uma série de situações práticas. Assim, um método ligeiramente mais expedito pode aproveitar o conhecimento acumulado para resolver o que falta.

Consideremos ainda a geometria da figura 2.7 com  $\alpha = 0$ . Efectuamos uma rotação de ângulo  $\beta$  em torno do eixo dos  $yy$  e obtemos o director

$$\begin{cases} n_x = \cos \theta \cos \phi \cos \beta - \sin \theta \sin \beta \\ n_y = \cos \theta \sin \phi \\ n_z = \cos \theta \cos \phi \sin \beta + \sin \theta \cos \beta \end{cases} \quad (2.22)$$

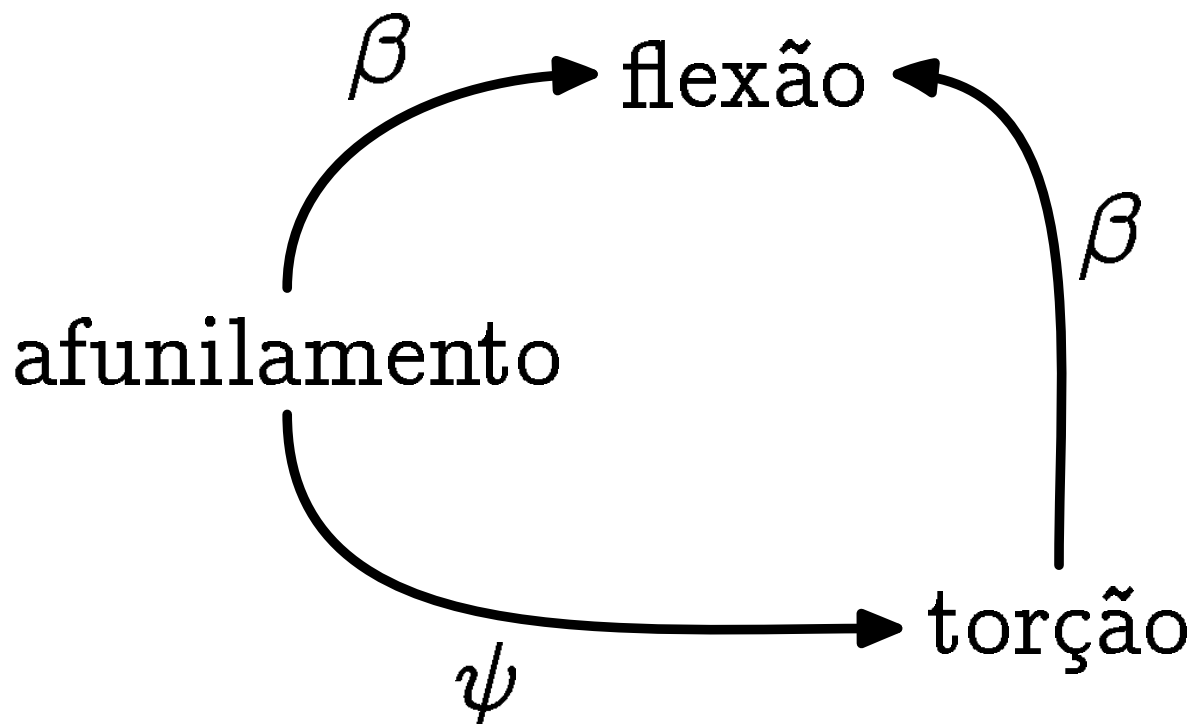


Figura 2.8: Andamento dos ângulos  $\beta$  e  $\psi$  nas três geometrias intermédias. O início das setas corresponde a ângulo nulo e o fim a  $\pi/2$  rad.

e o versor do campo magnético

$$\begin{cases} h_x = -\cos \psi \sin \beta \\ h_y = +\sin \psi \\ h_z = +\cos \psi \cos \beta \end{cases} \quad (2.23)$$

Agora, o aspecto fundamental do método utilizado consiste em constranger o tipo de soluções para a configuração do campo do director, reduzindo-as a uma determinada família de funções. A esta família damos o nome de *Ansatz*

$$\begin{cases} \theta(z) = \Theta_0 \cos\left(\frac{\pi}{d_c} z\right) \\ \phi(z) = \Phi_0 \cos\left(\frac{\pi}{d_c} z\right) \end{cases} \quad (2.24)$$

Sendo o nosso objectivo determinar  $\mathcal{M}_{aft}^*$ , a força magnética crítica para transição de Fréedericksz numa geometria qualquer (de confinamento planar), o *Ansatz* pode resumir-se ao termo de primeira ordem numa expansão em série de Fourier do campo do director que respeite as condições fronteira, válida quando as amplitudes  $\Theta_0$  e  $\Phi_0$  são pequenas. Esta informação é inserida na densidade média de energia livre (1.18) procedendo-se de seguida à expansão da função integranda ( $f$ ) até à segunda ordem em torno de  $(\Theta_0 = 0; \Phi_0 = 0)$  que corresponde à configuração inicialmente uniforme. Não é necessário ir para além da segunda ordem pois o que pretendemos é efectuar uma análise de estabilidade. Seguidamente calculamos o determinante  $\mathcal{D}$  da matriz hessiana do integral  $F$  em relação a  $\Theta_0$  e  $\Phi_0$ , ou seja, calculamos o determinante da matriz da estabilidade  $\mathcal{E}$ .

$$\mathcal{D} = |\mathcal{E}| = \begin{vmatrix} \frac{\partial^2 F}{\partial \Theta_0^2} & \frac{\partial^2 F}{\partial \Theta_0 \partial \Phi_0} \\ \frac{\partial^2 F}{\partial \Phi_0 \partial \Theta_0} & \frac{\partial^2 F}{\partial \Phi_0^2} \end{vmatrix} \quad (2.25)$$

Isto é equivalente a determinar a derivada de segunda ordem de uma função a uma variável. Permite distinguir entre pontos estáveis e instáveis desde que a primeira derivada nesses pontos seja nula. Os pontos interessantes são aqueles em que, simultaneamente,



1. As primeiras derivadas parciais de  $F$  em ordem a cada um dos parâmetros de configuração são nulas e
2.  $\mathcal{D} = 0$ .

A primeira destas condições é automaticamente satisfeita na origem ( $\Theta_0 = 0; \Phi_0 = 0$ ) devido a  $F$  não possuir termos independentes da configuração do director. Assim,  $\mathcal{M}_{aft}^*$  é solução da equação algébrica  $\mathcal{D} = 0$  em que se tomou  $\Theta_0 = 0$  e  $\Phi_0 = 0$ . Considerando

$$\mathcal{X} = \cos^2 \psi \tag{2.26}$$

$$\mathcal{Z} = \cos^2 \beta \tag{2.27}$$

obtemos

$$\mathcal{M}_{aft}^* = \frac{K_3 [1 + (K_1/K_3 - 1)\mathcal{Z}] [1 + (K_2/K_3 - 1)\mathcal{Z}]}{1 + (K_1/K_3 - 1)\mathcal{Z} + (K_2/K_3 - K_1/K_3)\mathcal{Z}\mathcal{X}} \tag{2.28}$$

O gráfico de  $\mathcal{M}_{aft}^*$  encontra-se representado na figura 2.9 para valores de  $\mathcal{X}$  e  $\mathcal{Z}$  que incluem as geometrias puras nos três cantos, as geometrias intermédias nos três bordos e as restantes no interior. A equação (2.28) pode agora ser reescrita de maneira mais compacta

$$\mathcal{M}_{aft}^* = \frac{\mathcal{M}_{af}^* \mathcal{M}_{tf}^*}{\mathcal{M}_{af}^* + (K_2 - K_1)\mathcal{X}\mathcal{Z}} \tag{2.29}$$

Em conclusão repare-se que o resultado (2.28) coincide com os apresentados em §2.2.4 para as geometrias intermédias.

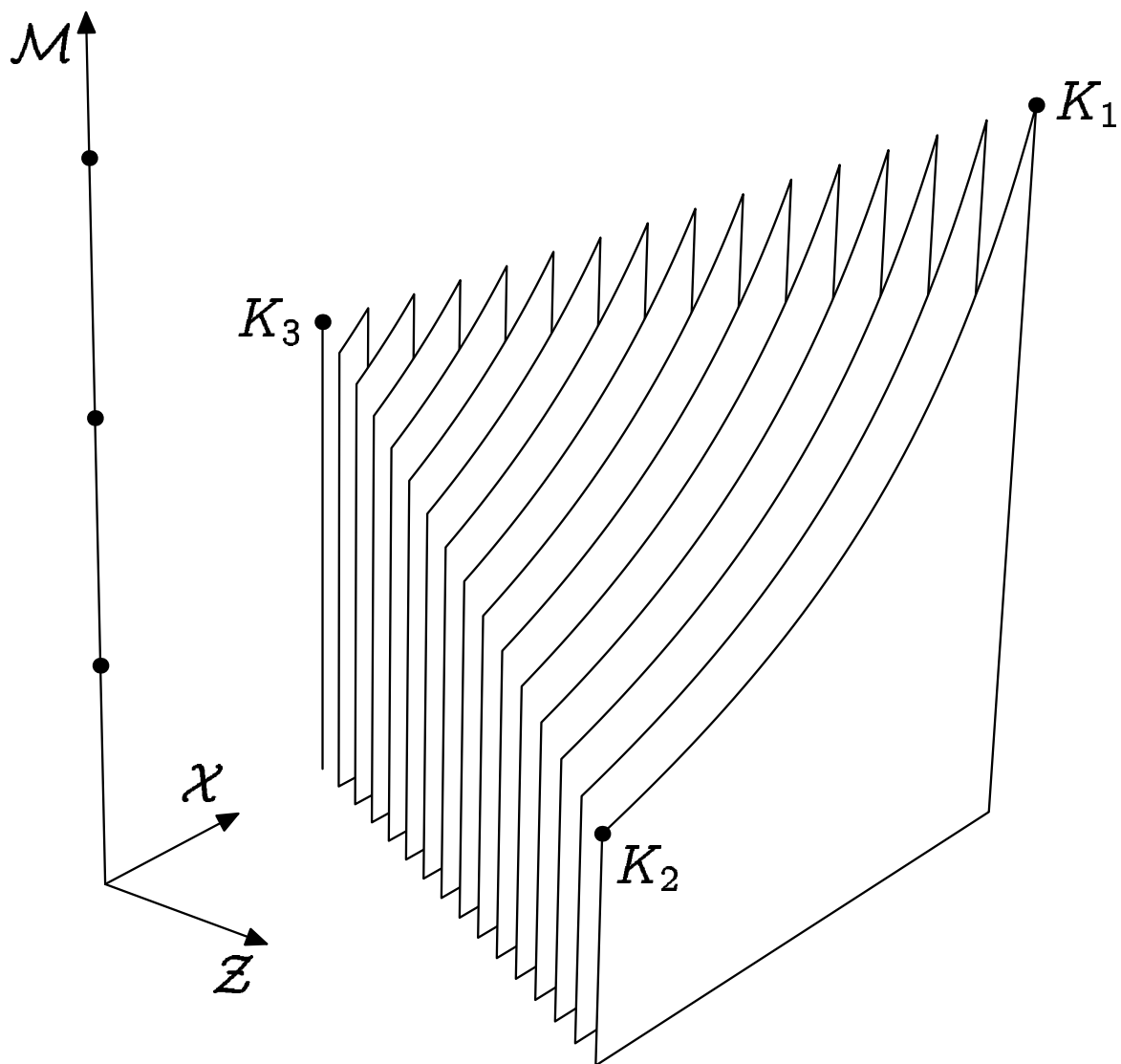


Figura 2.9: Força magnética crítica para transição de Fréedericksz homogénea no conjunto das geometrias estudadas nesta tese tal como obtida na equação (2.29). Em cada corte a  $Z$  constante  $\alpha$  varia de zero a um.

## 2.3 TRANSIÇÕES DE FRÉEDERICKSZ PERIÓDICAS

Como vimos anteriormente, acima do valor crítico da força magnética o campo do director deixa de ser uniforme passando a depender de  $z$ . Agora consideraremos situações em que, acima do valor crítico, o campo do director também se torna periódico numa direcção perpendicular a  $z$ . Uma das primeiras observações deste fenómeno foi efectuada por Cladis e Torza em 1975 [14] num estudo da transição N-SmA. Em 1985 Gooden *et al.* [41] confirmou essas observações e enquadrou-as na analogia das transições N-SmA e condutor-supercondutor já referida na página 5. Também em 1985 Lonberg e Meyer [60] explicaram o aparecimento da periodicidade no campo do director com base nas equações diferenciais. Em 1991 Cohen e Luskin [16] comprovaram matematicamente a existência de instabilidades periódicas, ou seja, demonstraram que a expressão da energia livre de Frank (1.18) é minimizável com configurações do campo do director que envolvem modulações bidimensionais.

### 2.3.1 GEOMETRIA DE AFUNILAMENTO PURO

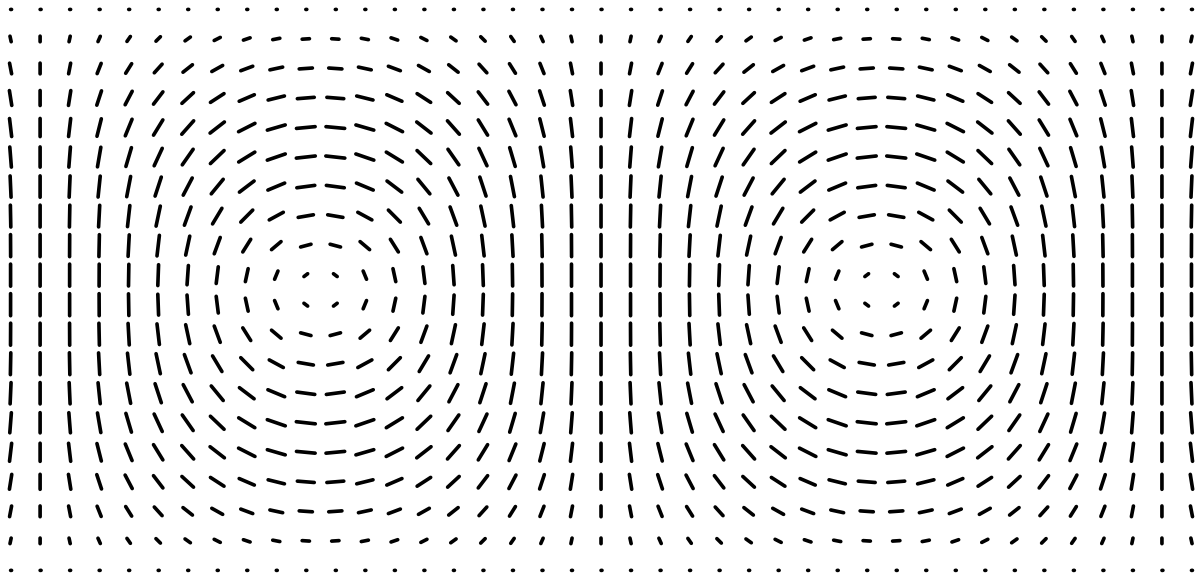


Figura 2.10: Representação do campo do director no plano  $yz$  da figura 2.7 com  $\alpha = 0$ ,  $\beta = 0$  e  $\psi = 0$  para  $\mathcal{M}$  acima da transição de Fréedericksz periódica na geometria de afunilamento puro.

Considere a geometria da figura 2.7 com  $\alpha = 0$ ,  $\beta = 0$  e  $\psi = 0$ . Considere também um *Ansatz* com periodicidade ao longo do eixo dos  $yy$  tal como representado na figura 2.10.

$$\begin{cases} \theta = \Theta_1 \cos\left(\frac{\pi}{d_c}z\right) \cos(qy) \\ \phi = \Phi_1 \sin\left(2\frac{\pi}{d_c}z\right) \sin(qy) \end{cases} \quad (2.30)$$

Este *Ansatz* é sugerido pelas soluções das equações diferenciais deduzidas por Lonberg *et al.* [60] para a mesma geometria. Note-se ainda que este *Ansatz* permite uma distorção homogénea com  $q = 0$ .

Podemos aplicar o método descrito em §2.2.6 com o cuidado necessário para as particularidades do novo parâmetro de configuração  $q$ . Referimo-las resumidamente já a seguir mas em §2.3.6 são descritas pormenorizadamente.

Agora que os parâmetros de configuração são  $\Theta_1$ ,  $\Phi_1$  e  $q$ , em vez de se tentar eliminar  $q$  da energia  $F$ , resolvendo  $\frac{dF}{dq} = 0$  em ordem a  $q$  (se  $F$  for mínima, não máxima) e substituindo em  $F$ , deve-se manter  $q$  como parâmetro livre até ao fim. Efectuar esta substituição corresponde a impôr uma relação de  $q$  com  $\Theta_1$  e  $\Phi_1$  que pode não ser válida em geral.

Calculando o determinante da matriz da estabilidade relativamente às amplitudes  $\Theta_1$  e  $\Phi_1$ , igualando a zero e resolvendo em ordem a  $H$  ou  $\mathcal{M}$  obtem-se o respectivo valor crítico. O valor de  $q$  na transição minimiza o valor crítico de  $H$  ou  $\mathcal{M}$ . A fronteira entre o domínio em que  $q$  é não nulo e o domínio em que não existe um  $q$  real que minimize  $H$  ou  $\mathcal{M}$  determina a razão crítica das constantes elásticas a partir da qual se forma ou deixa de se formar um distorção periódica. Assim há uma região do espaço de parâmetros em que, na expressão do valor crítico, se substitui a expressão de  $q$  que corresponde ao campo mínimo e há outra em que  $q = 0$ .

No caso do *Ansatz* (2.30) obtem-se

$$\mathcal{K}_{2/1}^* = \frac{1}{1 + \frac{3\pi}{4}} \simeq 0,298 \quad (2.31)$$

$$q_r^2 = \frac{4}{3}\pi(4 - (4 + 3\pi)\mathcal{K}_{2/1}) \quad (2.32)$$

$$\mathcal{M}_r^* = \frac{(-36\pi^2 - 64 + 96\pi)\mathcal{K}_{2/1}^2 + (128 - 96\pi)\mathcal{K}_{2/1} - 64 + 9\pi^2}{9\pi^2} \quad (2.33)$$

em que

$$\mathcal{K}_{2/1} = K_2/K_1 \quad (2.34)$$

$$q_r = q \frac{d_c}{\pi} \quad (2.35)$$

$$\mathcal{M}_r^* = \frac{\mathcal{M}^*}{\mathcal{M}_a^*} \quad (2.36)$$

A figura 2.11 contem o gráfico de  $\mathcal{M}_r^*(\mathcal{K}_{2/1})$  onde se pode verificar que para  $\mathcal{K}_{2/1} < \mathcal{K}_{2/1}^*$  obtemos  $\mathcal{M}^* < \mathcal{M}_a^*$ , ou seja, se  $K_2$  for suficientemente inferior a  $K_1$  a força magnética necessária para gerar uma configuração periódica é inferior à necessária para gerar uma configuração homogénea. O valor de  $\mathcal{K}_{2/1}^*$  depende ligeiramente do *Ansatz* que for utilizado pois  $\mathcal{K}_{2/1}^*$  representa a competição entre as configurações homogénea e periódica. Se o *Ansatz* contiver o termo seguinte da série de Fourier para a dependência em  $z$  obtemos  $\mathcal{K}_{2/1}^* \simeq 0,302$ , mais próximo do valor obtido em [67].

### 2.3.2 GEOMETRIA DE TORÇÃO PURA

No caso da geometria de torção ( $\alpha = 0$ ,  $\beta = 0$  e  $\psi = \pi/2$  rad) o *Ansatz* usado foi o equacionado a seguir e representado na figura 2.12

$$\begin{cases} \theta = \Theta_2 \sin\left(2\frac{\pi}{d}z\right) \sin(qy) \\ \phi = -\Phi_2 \cos\left(\frac{\pi}{d}z\right) \cos(qy) \end{cases} \quad (2.37)$$

Este *Ansatz* surge a partir de (2.30) pelo isomorfismo das equações diferenciais para a transformação

$$(K_1, K_2, \theta, \phi)_{x=1} \longleftrightarrow (K_2, K_1, \phi, -\theta)_{x=0} \quad (2.38)$$

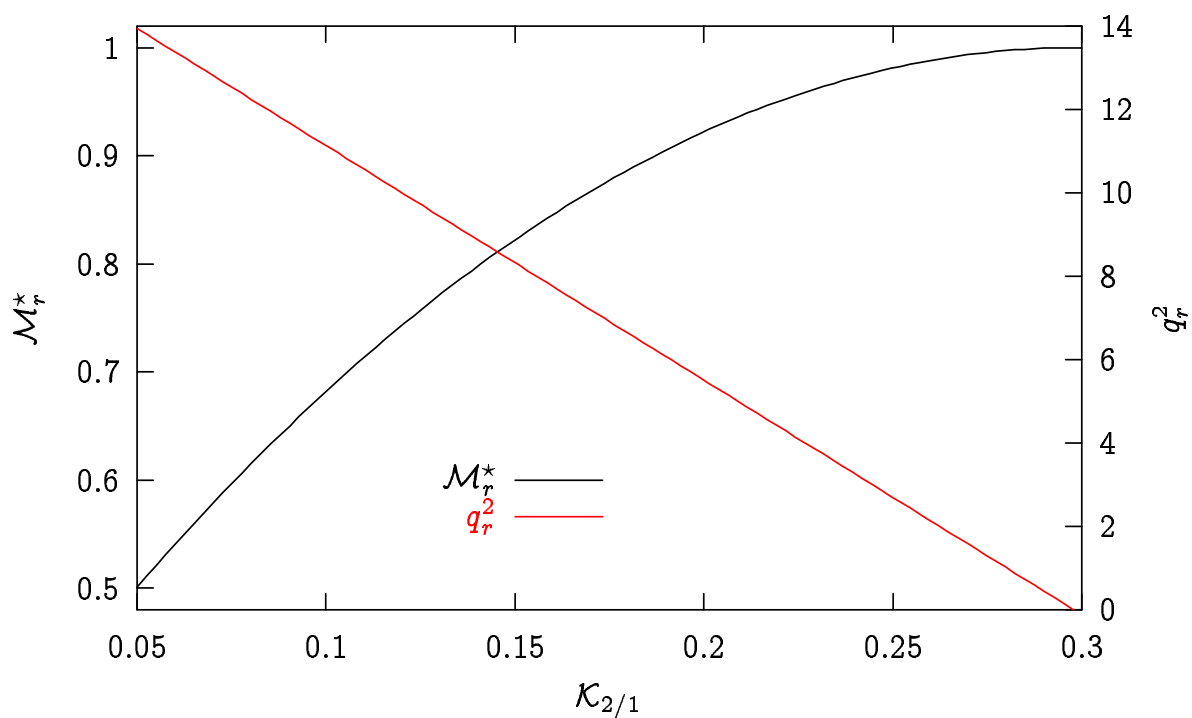


Figura 2.11: Força magnética crítica reduzida para a transição de Fréedericksz periódica na geometria de afunilamento puro. O valor de  $\mathcal{K}_{2/1}$  para o qual o vector de onda se anula corresponde a um ponto de Lifshitz.

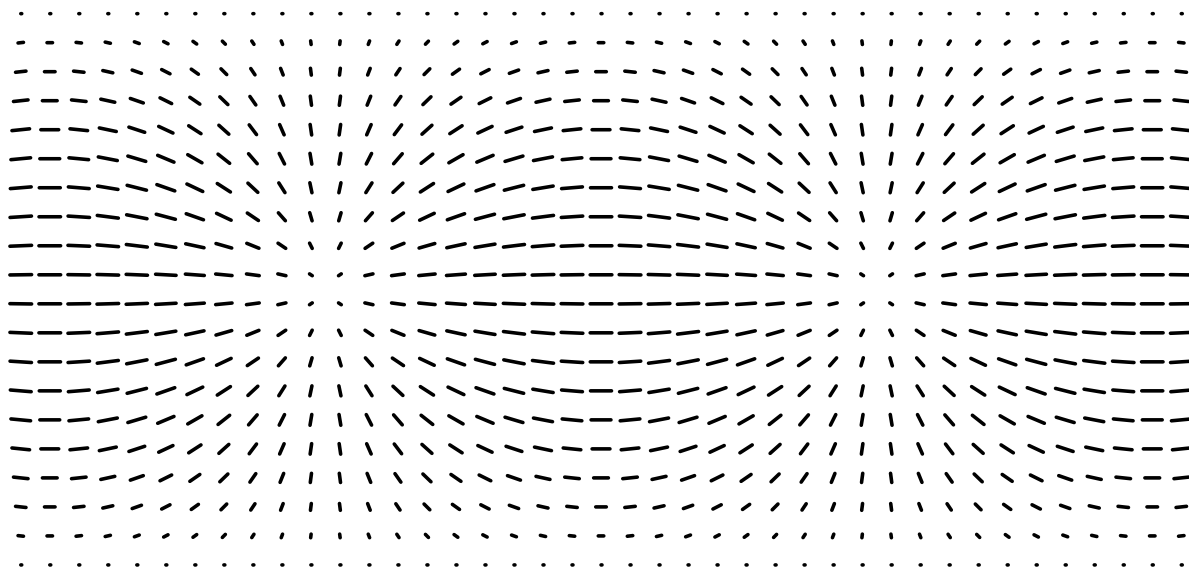


Figura 2.12: Representação do campo do director no plano  $yz$  da figura 2.7 com  $\alpha = 0$ ,  $\beta = 0$  e  $\psi = \pi/2$  rad para  $\mathcal{M}$  acima da transição de Fréedericksz periódica na geometria de torção pura.

tal como detectado por Kini [55]. E obtemos configurações periódicas para

$$\mathcal{K}_{2/1} > 1 + \frac{3\pi}{4} \quad (2.39)$$

ou seja, para valores de  $\mathcal{K}_{2/1}$  inversos dos obtidos em (2.31). Embora, tipicamente,  $K_2$  seja inferior a  $K_1$ , pode ocorrer o contrário próximo da transição N-SmA [13, §5.5].

### 2.3.3 GEOMETRIA DE FLEXÃO PURA

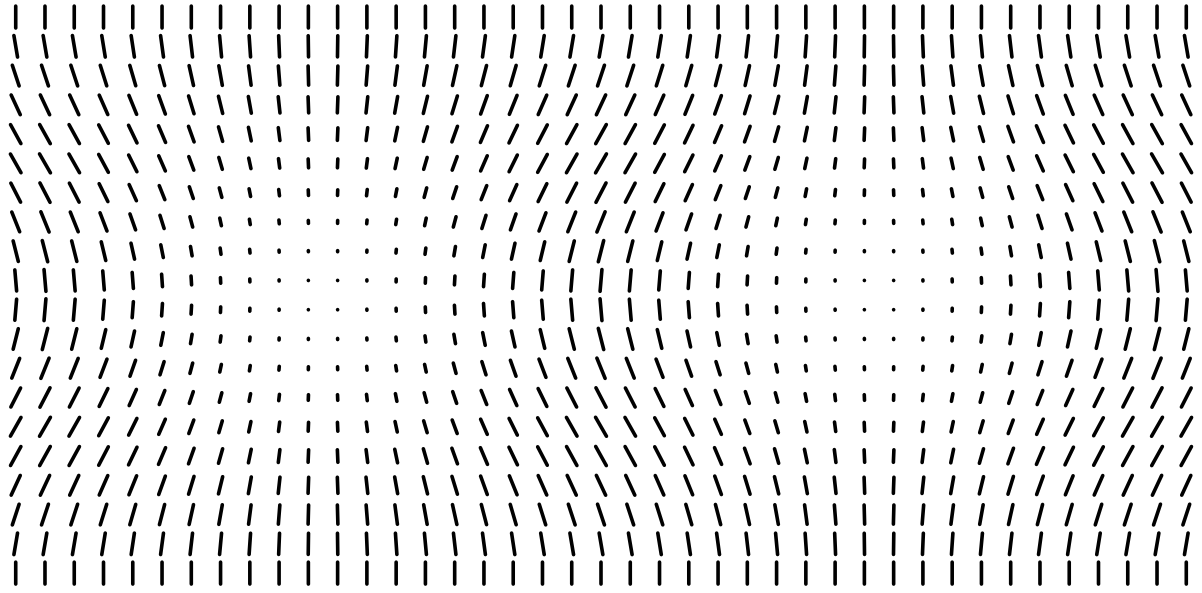


Figura 2.13: Representação do campo do director no plano  $yz$  da figura 2.7 com  $\alpha = 0$ ,  $\beta = \pi/2$  rad e  $\psi = 0$  para  $\mathcal{M}$  acima da transição de Fréedericksz periódica na geometria de flexão pura.

Considere a geometria da figura 2.7 com  $\alpha = 0$ ,  $\beta = \pi/2$  rad e  $\psi = 0$ . Considere também um *Ansatz* com periodicidade ao longo do eixo dos  $yy$  tal como representado na figura 2.13. Este *Ansatz* é o correspondente a (2.30) transformado por (2.22) com  $\beta = \pi/2$  rad. Obtemos os mesmos resultados que em §2.3.1. Não há competição com  $K_3$ .

### 2.3.4 TIPOS DE TRANSIÇÕES

Antes de avançarmos mais é conveniente esclarecer alguns aspectos relativos à caracterização das transições configuracionais que estamos a estudar.

Quando fazemos corresponder  $\mathcal{M}^*$  com  $\mathcal{D} = 0$  estamos implicitamente a assumir que as transições de configuração do campo do director ocorrem apenas na ausência de barreiras energéticas. De facto, a agitação térmica molecular é desprezável no contexto da transições de Fréedericksz [46]. Vamos recorrer à figura 2.14 para enquadrar este argumento mas só depois de definir o que são:

#### PARÂMETROS DE CONTRÔLE

Quantificam influências sobre a configuração. Identificaremos os parâmetros de controle pelo símbolo  $\Lambda$ . Em §2.3.1 temos

$$\Lambda = \{\mathcal{K}_{2/1}, \mathcal{M}_r\} \quad (2.40)$$

De maneira geral, as influências sobre a configuração podem ser quantificadas com grandezas adimensionais. Um subconjunto importante dos parâmetros de controle são os ângulos que definem a orientação de  $\vec{n}_0$  e de  $\hat{h}$ , ou seja, definem a geometria do problema. Identificaremos estes ângulos pelo símbolo  $\Xi$ . Na figura 2.7 temos

$$\Xi = \{\alpha, \beta, \psi\} \quad (2.41)$$

mas utilizaremos frequentemente as definições

$$\mathcal{X} = \cos^2 \psi \quad (2.42)$$

$$\mathcal{Z} = \cos^2 \beta \quad (2.43)$$

$$\mathcal{A} = \cos(2\alpha) \quad (2.44)$$

#### PARÂMETROS DE CONFIGURAÇÃO

Caracterizam a configuração. Identificaremos os parâmetros de configuração pelo símbolo  $\Upsilon$ . Em §2.3.1 temos

$$\Upsilon = \{\Theta_1, \Phi_1, q\} \quad (2.45)$$

Os parâmetros de configuração fazem necessariamente parte do *Ansatz*. Um subconjunto importante dos parâmetros de configuração são as amplitudes angulares  $\Upsilon'$  tais que

$$\Upsilon = \{q\} \cup \Upsilon' \quad (2.46)$$



A energia  $F$  é função de  $\Lambda$  e de  $\Upsilon$ . Para um dado  $\Lambda$ ,  $\Upsilon$  minimiza  $F$ . As transições configuracionais ocorrem quando uma pequena modificação de  $\Lambda$  provoca uma alteração qualitativa no conjunto  $\Upsilon$  que minimiza  $F$ . No caso de transições contínuas a “alteração qualitativa” consiste numa pequena alteração, tão pequena quanto se queira, dos valores dos parâmetros de configuração. A configuração descreve uma trajetória contínua no espaço de configurações. Isto está exemplificado na figura 2.14. Nesta figura tem-se uma transição contínua em  $\Lambda = 0$ . Para  $\Lambda > 0$  a energia é minimizada em dois valores distintos de  $\Upsilon$ . No entanto, esses dois mínimos têm a mesma energia. Isto implica que podem coexistir diferentes formas da mesma configuração caracterizadas por diversos valores de  $\Upsilon$ . Consequentemente, para valores de  $\Lambda$  positivos mas próximos de zero, a agitação térmica torna o sistema “indeciso” elevando o valor de  $\Lambda$  para o qual a transição ocorre. Por outro lado, quando existem configurações estáveis alternativas

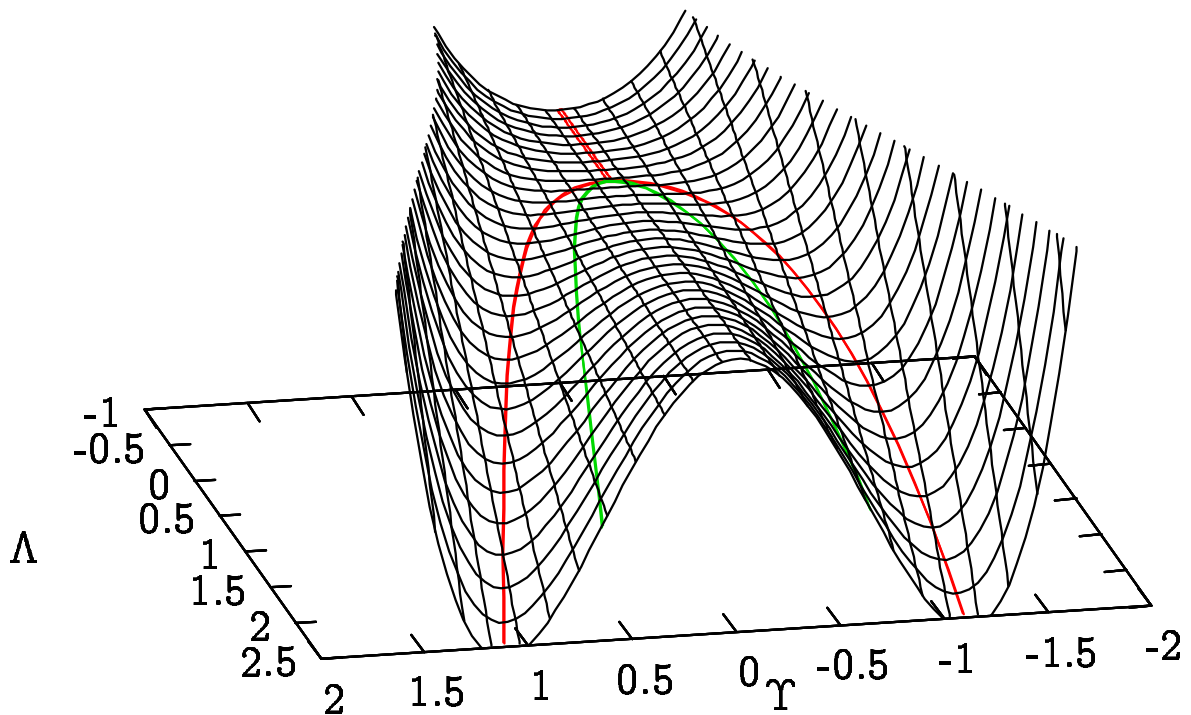


Figura 2.14: Deformação da curva da energia numa transição contínua. A linha vermelha une pontos de equilíbrio estável e a linha verde une pontos em que  $\mathcal{D} = 0$ . Na subida de  $\Lambda$  a configuração transita continuamente para  $\Upsilon$  não-nulo em  $\Lambda = 0$  (onde as linhas verde e vermelha coincidem).

a agitação térmica pode levar o sistema a transitar, mesmo com barreiras energéticas

entre as diferentes configurações . A transição pode ocorrer a partir da situação em que a configuração alternativa tem a mesma energia\* e até à situação em que a barreira energética desaparece. Agitação térmica reduzida (ou desprezável) implica transições próximas da (ou coincidentes com a) última destas situações, ou seja,

- Os valores críticos dos parâmetros de controle correspondem a ter-se, simultaneamente nulos, as primeiras derivadas da energia e o determinante da matriz da estabilidade em ordem aos parâmetros de configuração (ver figura 2.15).

Nestas condições é possível encontrar transições contínuas ou descontínuas, como acabámos de ver, e transições indirectas, como veremos em §2.3.8.

### 2.3.5 TIPOS DE PONTOS CRÍTICOS

Uma vez determinados os valores críticos dos parâmetros de controle é possível desenhar diagramas de configuração no espaço destes parâmetros. Nestes diagramas é possível identificar regiões correspondentes a diferentes tipos de configuração. Estas regiões são, por sua vez, limitadas por fronteiras de diferentes tipos. Estas fronteiras também são, por sua vez limitadas por diferentes tipos de “delimitadores” e assim sucessivamente até se esgotarem as dimensões do espaço de parâmetros de controle. No sentido de evitar confundir casos de diferente dimensionalidade, considere-se um espaço tridimensional. De entre os diversos tipos de pontos críticos que é possível encontrar neste espaço interessa-nos definir:

#### PONTO MULTICRÍTICO

Os pontos multicríticos são pontos de transição configuracional contínua [13, §5.9].

#### PONTO TRICRÍTICO

Os pontos tricríticos encontram-se na confluência de uma fronteira de transição contínua com uma fronteira de transição descontínua [13, §5.10]. Um ponto deste tipo está indicado na figura 2.17.

---

\*pois a energia do sistema não aumenta espontaneamente

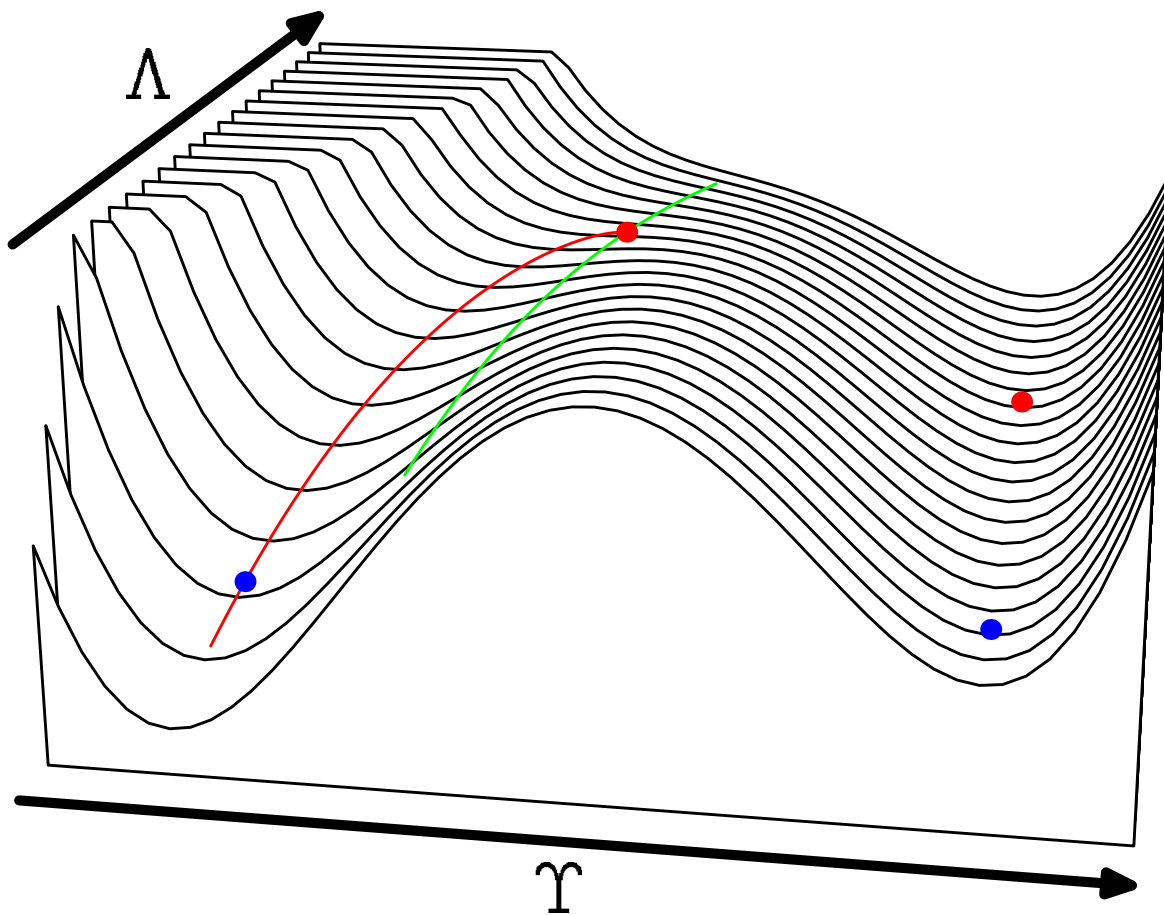


Figura 2.15: Exemplo de deformação da curva da energia numa transição descontínua. A linha vermelha une pontos de equilíbrio estável e a linha verde une pontos em que  $\mathcal{D} = 0$ . Intensa agitação térmica provoca uma transição entre os dois pontos azuis (de energias iguais). Agitação térmica desprezável implica uma transição entre os dois pontos vermelhos.

## PONTO DE LIFSHITZ

Os pontos de Lifshitz são pontos multicríticos em que um dos parâmetros de configuração que transita continuamente é o vector de onda [13, §5.9]. O vector de onda é nulo numa das regiões em contacto com o ponto.

## PONTO BICRÍTICO

Os pontos bicríticos encontram-se nas linhas de contacto de três superfícies fronteira sendo duas de transição contínua e uma de transição descontínua [13, §5.6.1].

Encontra-se um destes pontos na figura 2.18.

### 2.3.6 O MÉTODO UTILIZADO EM DETALHE

Começamos por reescrever a densidade média de energia de orientação (1.18) da seguinte forma

$$F = \frac{1}{\Omega} \int_{\Omega} f(\vec{n}, \vec{q} \cdot \vec{r}, \text{grad } \vec{n}; K_{\alpha}, \chi_a H^2) d\Omega \quad (2.47)$$

Esta forma permite realçar as dimensões das variáveis que determinam a densidade de energia.  $\vec{n}$  e  $\vec{q} \cdot \vec{r}$  são adimensionais. Os gradientes do director  $\text{grad } \vec{n}$  são curvaturas com dimensões de vector de onda e que tornam os termos elásticos análogos a  $KAq^2$  onde  $K$  é uma constante elástica,  $q^2$  uma componente quadrada do vector de onda e  $A$  um factor adimensional que é uma função das amplitudes angulares  $\Upsilon^*$  e dos ângulos  $\psi$ ,  $\alpha$  e  $\beta$ . O cálculo do integral após a expansão em série de  $f$  em ordem às amplitudes angulares fornece uma expressão do tipo

$$\begin{aligned} F = & + K_1 \sum_i A_i q_i^2 \\ & + K_2 \sum_i B_i q_j^2 \\ & + K_3 \sum_i C_i q_k^2 \\ & - D \chi_a H^2 \end{aligned} \quad (2.48)$$

---

\*Parâmetros de configuração com excepção do vector de onda.

onde  $D$  é um polinómio em  $\psi$ ,  $\alpha$  e  $\beta$  e os  $q_i^2$  são produtos de duas componentes do vector de onda  $\vec{q}$ . A expansão em série de  $f$  sobre as amplitudes angulares é calculada em torno dos valores correspondentes a uma configuração conhecida. É a estabilidade dessa configuração, face a alterações nas amplitudes angulares de contróle, que se pretende determinar. Nos exemplos de transições de Fréedericksz dados anteriormente a configuração conhecida corresponde a campo do director uniforme e amplitudes angulares nulas (ausência de curvatura). Note-se que o cálculo do integral  $F$  seria inteiramente deturpado se a expansão em série incluísse o vector de onda. Perder-se-ia o constrangimento da periodicidade. Nos *Ansätze* que temos utilizado (e nos próximos) o vector de onda encontra-se livre para tomar qualquer valor quando as amplitudes angulares são nulas. Isto corresponde à realidade de um domínio nemático não distorcido, onde a agitação térmica gera uma distribuição de ondulações do director. Na sequência do argumento desenvolvido na página 42 assumimos que

- A amplitude das ondulações do campo do director devidas à agitação térmica é desprezável no âmbito da análise de estabilidade que efectuamos\*.
- O vector de onda não é desprezável de maneira geral.

Agora adimensionalizamos a expressão anterior dividindo por uma constante elástica e por uma componente quadrada do vector de onda. Este último só pode ser o que é determinado pelas condições fronteira:

$$q_z = \frac{\pi}{d_c} \tag{2.49}$$

pois as outras componentes de  $\vec{q}$  são parâmetros de configuração ainda desconhecidos. Assim, obtemos para a densidade média de energia de orientação adimensionalizada uma expressão do tipo

$$F_r = -D\mathcal{M}_r + \sum \mathcal{K}_{\alpha/\beta} A q_r^2 \tag{2.50}$$

---

\*No âmbito dos modelos dinâmicos de §3 é calculada a amplitude das ondulações do campo do director devidas à agitação térmica.

Seguidamente calculamos a matriz da estabilidade e o seu determinante

$$\mathcal{E}_{ij} = \frac{\partial^2 F_r}{\partial \Upsilon'_i \partial \Upsilon'_j} \quad (2.51)$$

$$\mathcal{D} = |\mathcal{E}| \quad (2.52)$$

onde  $\Upsilon'$  é o subconjunto de  $\Upsilon$  que não contém as componentes do vector de onda. O determinante  $\mathcal{D}$  é um polinómio multivariado em  $\Lambda_r^*$  e nas componentes reduzidas quadradas do vector de onda. Este polinómio tem um grau tanto mais elevado quanto maior for o número de parâmetros de configuração. O campo crítico ou  $\mathcal{M}^*$  resultam da equação

$$\mathcal{D}(\mathcal{M}_r, \mathcal{K}_{\alpha/\beta}, \mathcal{K}_{\gamma/\beta}, \mathcal{X}, \mathcal{Z}, q_r^2) = 0 \quad (2.53)$$

mas não directamente. Lonberg *et al.* [60] sugere que esta equação seja resolvida em ordem a  $\mathcal{M}_r$  e que se determine o  $q_r^2$  que minimiza  $\mathcal{M}_r$ . Assim,  $\mathcal{M}_r^*$  é o mínimo valor de  $\mathcal{M}_r$  para o qual existe um  $q_r^2$  que o minimiza. Isto é a maneira matemática de dizer que ao aumentar a força magnética uma das ondulações que percorrem o campo do director ganha uma vantagem energética que desestabiliza a configuração inicial. O valor de  $\mathcal{M}$  em que a desestabilização ocorre é o valor crítico e o valor de  $q_r^2$  que a produziu corresponde ao vector de onda seleccionado.

Porém, o vector de onda seleccionado não tem que ser calculado a partir de

$$\mathcal{M}_r(\mathcal{K}_{\alpha/\beta}, \mathcal{K}_{\gamma/\beta}, \mathcal{X}, \mathcal{Z}, q_r^2) \quad (2.54)$$

Esta função é, em geral, bastante complicada, o que também dificulta o cálculo do seu mínimo:

$$\frac{\partial \mathcal{M}_r}{\partial (q_r^2)} = 0 \quad (2.55)$$

Esta equação só minimiza  $\mathcal{M}_r$  se

$$\frac{\partial^2 \mathcal{M}_r}{\partial (q_r^2)^2} > 0 \quad (2.56)$$

---

\*Conjunto dos parâmetros reduzidos de contrôle.

Assim, preferimos introduzir na equação (2.53) o conhecimento de que  $\mathcal{M}_r$  é função do vector de onda, o que nos permite escrever

$$\frac{d\mathcal{D}}{d(q_r^2)} = \frac{\partial\mathcal{D}}{\partial(q_r^2)} + \frac{\partial\mathcal{D}}{\partial\mathcal{M}_r} \frac{\partial\mathcal{M}_r}{\partial(q_r^2)} = 0 \quad (2.57)$$

e permite dizer que quando se tem, simultaneamente, (2.55) e (2.53), então

$$\frac{\partial\mathcal{D}}{\partial(q_r^2)} = 0 \quad (2.58)$$

Uma vez que  $\mathcal{D}$  é um polinómio,  $q_r^2$  pode ser obtido de maneira *standard*. Tem que ser nulo ou positivo. Se vier negativo consideramo-lo nulo. O seu valor é introduzido em (2.54) para obtermos  $\mathcal{M}_r^*$ . Este valor crítico da força magnética reduzida corresponde a uma transição para uma configuração homogénea se o vector de onda for nulo e corresponde a uma transição para uma configuração periódica se o vector de onda for positivo. No entanto, ainda que o vector de onda venha positivo é preciso verificar se  $\mathcal{M}_r^*(q_r^2)$  é mesmo inferior ao que se obteria para a transição homogénea. Situações há em que quando se atinge o campo crítico para a transição periódica já se ultrapassou o campo crítico para a transição homogénea.

### 2.3.7 GEOMETRIA DE AFUNILAMENTO-TORÇÃO

Um *Ansatz* válido para ambas as geometrias de afunilamento e de torção e que respeitasse as condições fronteira  $n_x(z = \pm d_c/2) = 1$  tinha que ser uma combinação dos apresentados em §2.3.1 e §2.3.2.

$$\left\{ \begin{array}{l} \theta = + \Theta_2 \sin\left(\frac{2\pi}{d_c}z\right) \sin(qy) \\ \quad + \Theta_1 \cos\left(\frac{\pi}{d_c}z\right) \cos(qy) \\ \phi = - \Phi_2 \cos\left(\frac{\pi}{d_c}z\right) \cos(qy) \\ \quad + \Phi_1 \sin\left(\frac{2\pi}{d}z\right) \sin(qy) \end{array} \right. \quad (2.59)$$

O director e o versor do campo magnético continuam a ser dados, respectivamente, por (2.22) e (2.23), neste caso, com  $\beta = 0$ . Este *Ansatz* permite adicionar  $\mathcal{X}$  aos

parâmetros de controle. A aplicação do método utilizado revela, em primeiro lugar, que o isomorfismo (2.38) se estende para

$$(K_1, K_2, \theta, \phi, \mathcal{X}) \longleftrightarrow (K_2, K_1, \phi, -\theta, 1 - \mathcal{X}) \quad (2.60)$$

e, em segundo lugar, que o ponto de Lifshitz representado na figura 2.11 muda para bicrítico quando  $\mathcal{X}$  se afasta dos extremos (figura 2.16). Esta mudança tem lugar num ponto tricrítico de coordenadas ( $\mathcal{X} = 0,9907; \mathcal{K}_{2/1} = 0,2648$ ). Estas coordenadas podem ser determinadas por analogia com transições de fase em teorias de campo médio [49, §17.6] pois  $q_r$  é análogo a um parâmetro de ordem e  $\mathcal{M}$  é análoga a um potencial (ver [11] em §H). A figura 2.17 mostra, para além da localização do ponto tricrítico, um diagrama de configuração onde se introduzem os símbolos H e P para designar, respectivamente, região de configuração homogénea e região de configuração periódica. A linha de representada na figura 2.17 é determinada pela igualdade das forças magnéticas críticas para as transições homogénea e periódica.

Na figura 2.18 mostra-se um outro diagrama de configuração obtido com  $\mathcal{K}_{3/1} = 1$  e  $\mathcal{K}_{2/1} = 0,2$ . O símbolo U designa uma região de configuração uniforme. Se tivéssemos  $\mathcal{K}_{2/1} > 0,298$  recuperariamos o corte a  $\mathcal{Z} = 1$  representado na figura 2.9 pois não seria possível ter configurações periódicas. Ambos os diagramas das figuras 2.17 e 2.18 são cortes do diagrama de configurações no espaço tridimensional de parâmetros de controle com  $\mathcal{K}_{3/1} = 1$ . Não mostramos o diagrama tridimensional porque a determinação da transição H-P envolve as dificuldades que descrevemos a seguir. A primeira dificuldade está no facto de o *Ansatz* (2.59) não permitir configurações compostas simultaneamente com distorções homogénea e periódica. Esta dificuldade ultrapassa-se combinando o



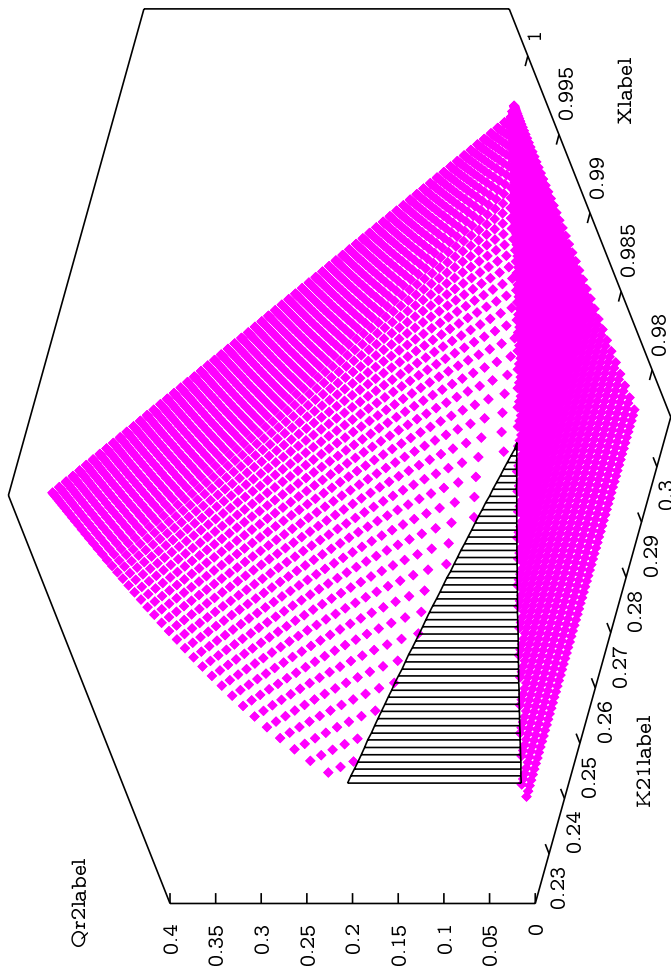


Figura 2.16: Vector de onda quadrado reduzido, que minimiza a força magnética crítica para a transição periódica na geometria de afunilamento-torção, para valores de  $\mathcal{X}$  próximos dos correspondentes ao afunilamento puro. A transição entre as configurações homogênea e periódica pode ser contínua ou descontínua.

*Ansatz* anterior com (2.24).

$$\left\{ \begin{array}{l} \theta = + \Theta_0 \cos\left(\frac{\pi}{d_c}z\right) \\ \quad + \Theta_2 \sin\left(2\frac{\pi}{d_c}z\right) \sin(qy) \\ \quad + \Theta_1 \cos\left(\frac{\pi}{d_c}z\right) \cos(qy) \\ \phi = \Phi_0 \cos\left(\frac{\pi}{d_c}z\right) \\ \quad - \Phi_2 \cos\left(\frac{\pi}{d_c}z\right) \cos(qy) \\ \quad + \Phi_1 \sin\left(2\frac{\pi}{d_c}z\right) \sin(qy) \end{array} \right. \quad (2.61)$$

Este *Ansatz* não considera a componente em  $x$  do vector de onda porque, quando incluída, minimiza  $\mathcal{M}$  apenas para valores complexos. A segunda dificuldade resulta da primeira e consiste em ter-se um grau elevado no polinómio  $\mathcal{D}$ . A determinação dos valores críticos já não pode ser efectuada de maneira essencialmente analítica. Torna-se

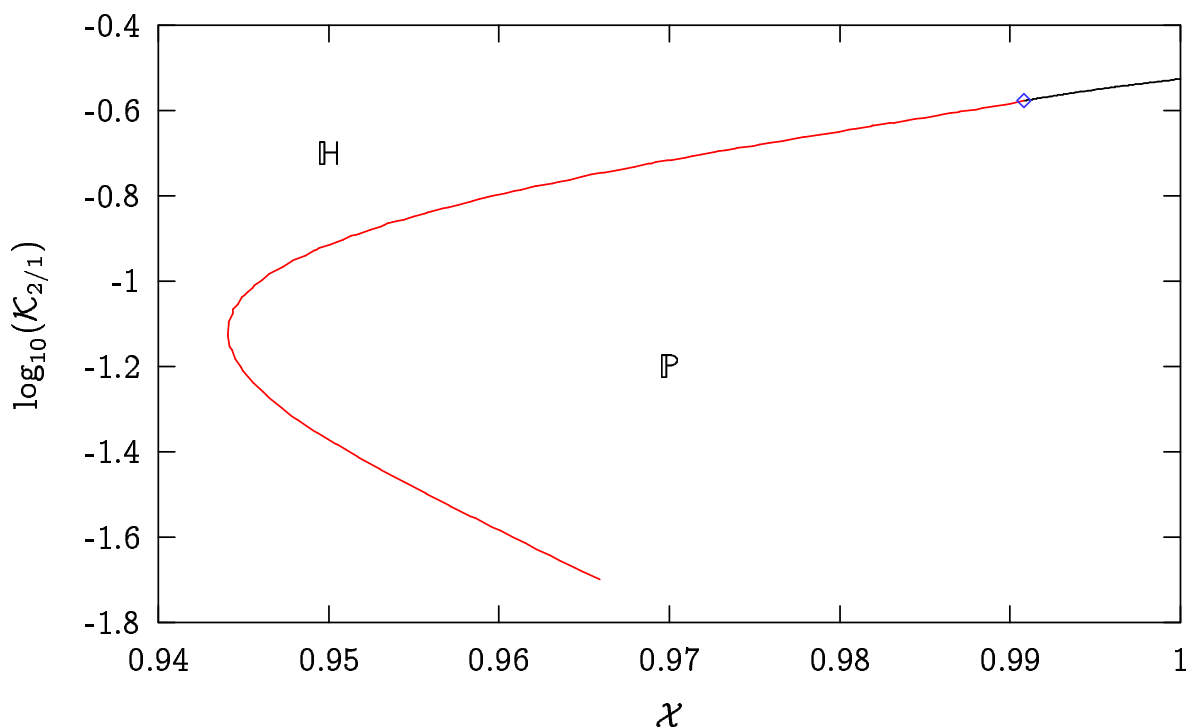


Figura 2.17: Corte a  $q_r = 0$  da superfície representada na figura 2.16. A linha negra une pontos de Lifshitz. A linha vermelha une pontos bicríticos. As duas linhas são unidas por um ponto tricrítico.

necessário também efectuar minimizações numéricas de

$$F_r = \frac{F}{\mathcal{M}_t^* q_z^2} \quad (2.62)$$

numa malha de valores dos parâmetros de controle. Mesmo assim é possível obter uma boa aproximação analítica para  $F_r$  expandindo  $f_r$  até à quarta ordem. A transição já não ocorre a partir de valores nulos das amplitudes angulares. Quando se aumenta  $\mathcal{M}$ , dependendo do valor de  $\mathcal{X}$ , pode ocorrer uma transição U-H ou uma transição U-P mas acima do valor crítico para a transição U-P existem dois mínimos de  $F_r$  no espaço de parâmetros de configuração. Um mínimo correspondente à configuração periódica P e outro correspondente à configuração homogénea H. Isto quer dizer que, eventualmente, pode ocorrer uma transição P-H. No sentido de reduzir o tamanho da malha de valores dos parâmetros de controle optamos por determinar o valor de  $\mathcal{M}$  para o qual ambos os mínimos têm a mesma energia (como os pontos azuis da figura 2.15). Desta forma as regiões P e H na figura 2.18 são separadas por uma linha de eventuais transições descontínuas.

### 2.3.8 GEOMETRIA DE AFUNILAMENTO-FLEXÃO

Nesta geometria torna-se necessário acrescentar um termo das séries de Fourier para a dependência em  $z$  do *Ansatz*.

$$\left\{ \begin{array}{l} \theta = + [\Theta_0 + \Theta_1 \cos(q_x x + q_y y)] \cos(\pi z/d_c) \\ \quad + [\Theta_3 + \Theta_4 \cos(q_x x + q_y y)] \cos(3\pi z/d_c) \\ \quad + [\Theta_2 \sin(2\pi z/d_c) + \Theta_5 \sin(4\pi z/d_c)] \sin(q_x x + q_y y) \\ \phi = + [\Phi_0 + \Phi_2 \cos(q_x x + q_y y)] \cos(\pi z/d_c) \\ \quad + [\Phi_3 + \Phi_4 \cos(q_x x + q_y y)] \cos(3\pi z/d_c) \\ \quad + [\Phi_1 \sin(2\pi z/d_c) + \Phi_5 \sin(4\pi z/d_c)] \sin(q_x x + q_y y) \end{array} \right. \quad (2.63)$$

Assim o *Ansatz* pode descrever, com suficiente precisão, transições U-H, U-P, H-P e também P-H. Estas transições, para além de poderem ser descontínuas, também podem

ser indirectas. Por exemplo a transição  $\mathbb{U}$ - $\mathbb{H}$  é, em geral, descontínua (ver [32] em §H) quando

$$K_3 \neq K_1. \quad (2.64)$$

E o estado periódico ( $\mathbb{P}$ ) pode ser atingido, quer directamente, a partir do estado uniforme ( $\mathbb{U}$ ), quer indirectamente, através do estado homogéneo ( $\mathbb{H}$ ). Por outro lado, encontramos um novo campo crítico, para a transição  $\mathbb{U}$ - $\mathbb{H}$ , em determinadas gamas dos rácios das constantes elásticas e do ângulo de inclinação, devido ao facto desta transição poder ser indirecta, através do estado periódico. As transições indirectas são sempre descontínuas. O *Ansatz* (2.63) contém doze amplitudes angulares, quatro das quais definem configurações homogéneas

$$\Upsilon^{\mathbb{H}} = \{\Theta_0, \Theta_3, \Phi_0, \Phi_3\} \quad (2.65)$$

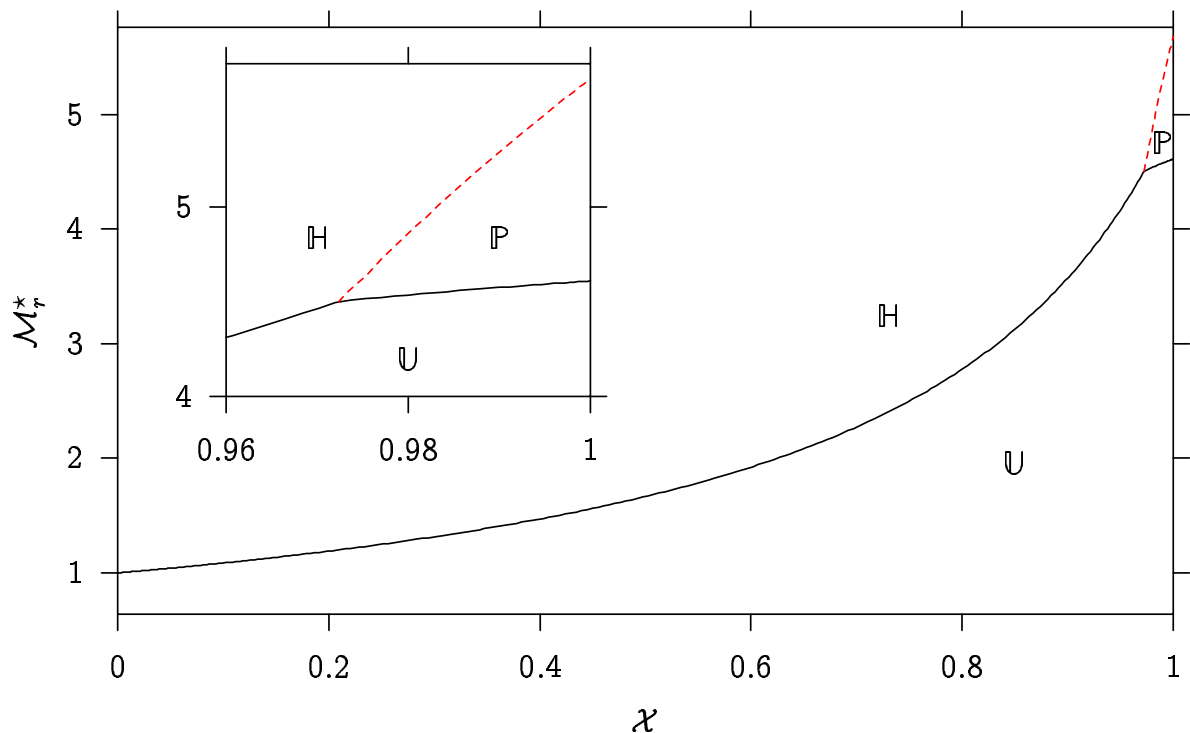


Figura 2.18: Diagrama de configurações na geometria de funilamento-torção para  $\log_{10}(\mathcal{K}_{2/1}) = -0,7$  e  $K_3 = K_1$ .

e as restantes definem configurações periódicas

$$\Upsilon' = \Upsilon'^{\text{H}} \cup \Upsilon'^{\text{P}} \quad (2.66)$$

A intersecção dos dois subconjuntos de amplitudes angulares é vazia mas designamos por *periódicas* as configurações em que ambos os subconjuntos contêm elementos não nulos. A figura 2.19 permite visualizar a forma da energia pouco acima duma transição U-P indirecta.

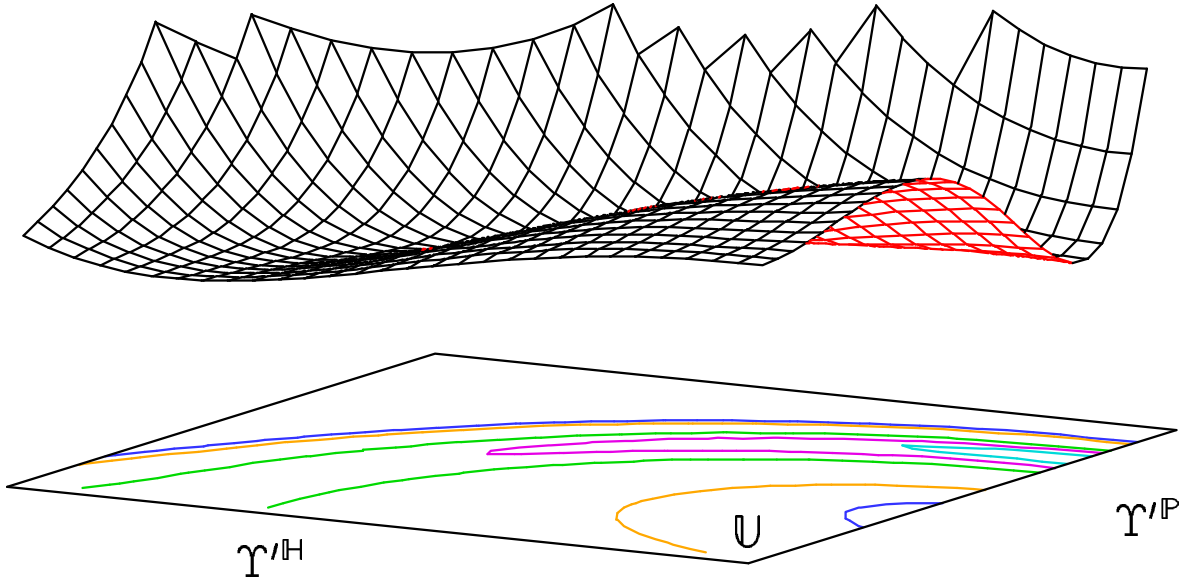


Figura 2.19: Forma da energia pouco acima duma transição U-P indirecta. A configuração U é instável relativamente a H mas esta é também instável relativamente a P.

O elevado número de amplitudes angulares impede um tratamento analítico. No sentido de reduzir o peso do cálculo numérico modificamos a definição das componentes do director de (2.22) para

$$\begin{aligned} n_x &= \cos(\theta + \gamma) \cos \phi \\ n_y &= \cos(\theta + \gamma) \sin \phi \\ n_z &= \sin(\theta + \gamma) \end{aligned} \quad (2.67)$$

de acordo com a figura 2.20. O versor do campo magnético é

$$\begin{cases} h_x = -\sin \gamma \\ h_y = 0 \\ h_z = \cos \gamma \end{cases} \quad (2.68)$$

Escolhemos adimensionalizar a densidade média de energia de orientação da seguinte forma

$$F_r = \frac{F}{\mathcal{M}_{af}^* q_z^2} \quad (2.69)$$

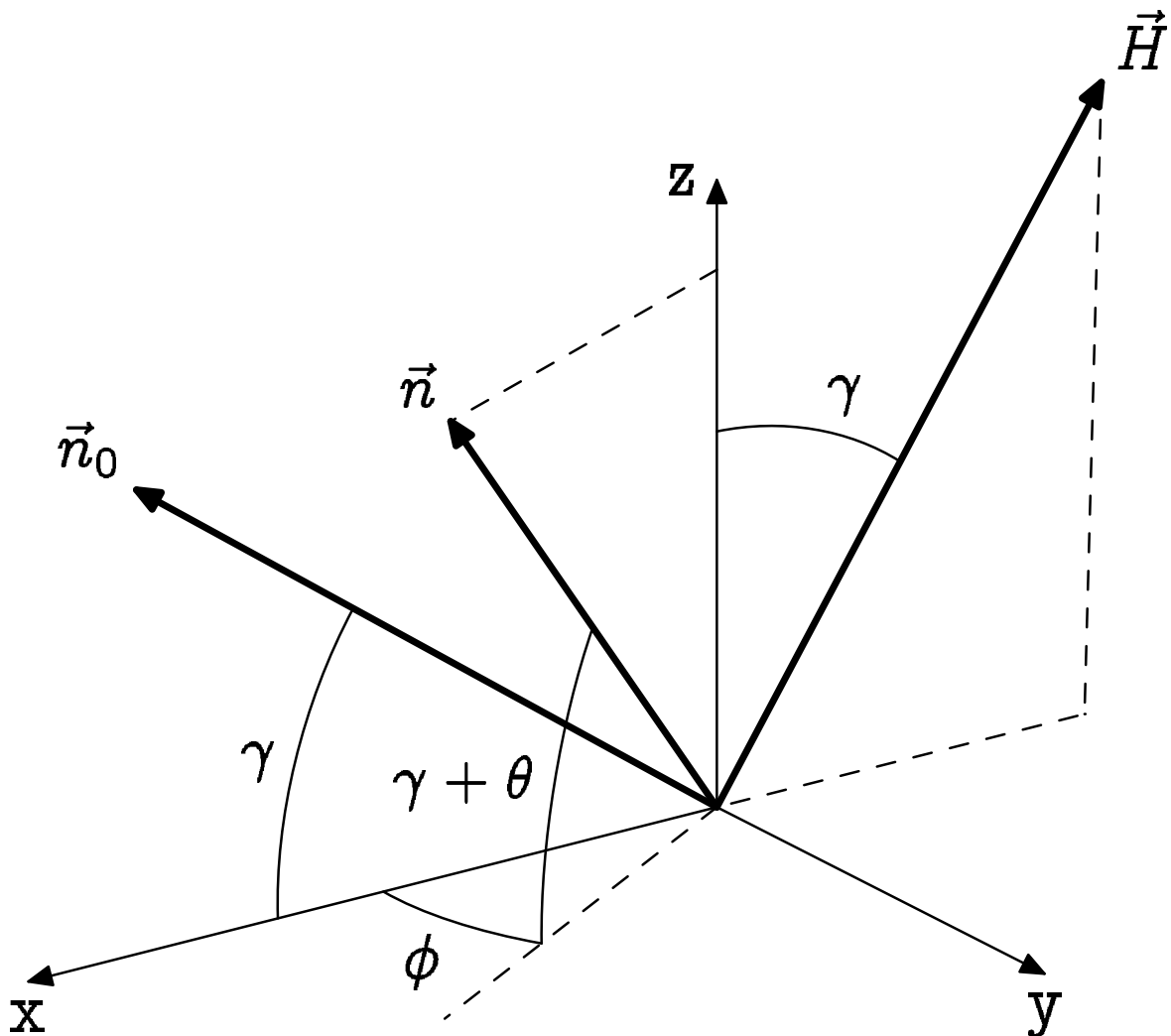


Figura 2.20: Director nemático e campo magnético na geometria de afunilamento-flexão. As fronteiras planas estão a  $z = \pm d_c/2$ .

Tendo em conta os resultados mencionados anteriormente relativos ao aparecimento de  $\mathbb{P}$  nas geometrias de flexão e afunilamento puros [2, 60], a nossa análise começa com o cálculo da relação entre  $\mathcal{M}_r$ ,  $\mathcal{K}_{1/3}$ ,  $\mathcal{K}_{2/1}$  e  $\gamma$  no limite de estabilidade de  $\mathbb{U}$  face ao aparecimento de  $\mathbb{P}$ .

No sentido de obter a matriz hessiana ou matriz da estabilidade de  $F_r$  relativamente às amplitudes ligadas à existência de  $\mathbb{P}$ , não é necessário considerar a forma completa de  $F_r$  mas apenas a sua expansão até à segunda ordem nessas mesmas amplitudes. Isto é vantajoso para a implementação das integrações que aparecem em  $F_r$ . A matriz da estabilidade em  $\mathbb{U}$  é

$$\mathcal{E}_{ij} \equiv \left. \frac{\partial^2 F_r}{\partial \Upsilon_i^{\mathbb{P}} \partial \Upsilon_j^{\mathbb{P}}} \right|_{\Upsilon_k^{\mathbb{P}}=0} \quad (2.70)$$

No limite de estabilidade de  $\mathbb{U}$  o determinante  $\mathcal{D}$  é nulo. Daqui resulta uma equação implícita que relaciona a força magnética reduzida crítica com  $\mathcal{K}_{2/1}$ ,  $\mathcal{K}_{3/1}$ ,  $\gamma$  e  $\vec{q}_r$ . O vector de onda seleccionado minimiza  $\mathcal{D}$  (2.58) e de

$$\mathcal{D}_{\min}(\mathcal{M}_r^{\mathbb{U}\mathbb{P}}, \mathcal{K}_{3/1}, \mathcal{K}_{2/1}, \gamma) = 0 \quad (2.71)$$

obtemos a desejada relação entre  $\mathcal{M}_r^{\mathbb{U}\mathbb{P}}$ ,  $\mathcal{K}_{2/1}$ ,  $\mathcal{K}_{3/1}$  e  $\gamma$  válida no limite de estabilidade de  $\mathbb{U}$  face ao aparecimento de  $\mathbb{P}$ .  $\mathcal{M}_r^{\mathbb{U}\mathbb{P}}$  é a partir daqui definida como o valor da força magnética reduzida em que  $\mathbb{U}$  perde estabilidade para  $\mathbb{P}$ . Tal como foi visto na geometria de flexão pura [2] a configuração  $\mathbb{H}$  pode tornar-se instável face ao aparecimento de  $\mathbb{P}$ , o que constitui uma sequência alternativa para a formação de  $\mathbb{P}$ . No limite de estabilidade de  $\mathbb{H}$  o determinante da matriz da estabilidade (2.70) calculado em  $\mathbb{H}$ , anula-se. O vector de onda seleccionado minimiza  $\mathcal{D}$  e, tal como anteriormente, de

$$\mathcal{D}_{\min}(\mathcal{M}_r^{\mathbb{H}\mathbb{P}}, \mathcal{K}_{3/1}, \mathcal{K}_{2/1}, \gamma) = 0 \quad (2.72)$$

obtem-se a relação entre  $\mathcal{M}_r^{\mathbb{H}\mathbb{P}}$ ,  $\mathcal{K}_{2/1}$ ,  $\mathcal{K}_{3/1}$  e  $\gamma$  válida no limite de estabilidade de  $\mathbb{H}$ . A equação (2.72) representa superfícies de mudança de estabilidade de  $\mathbb{H}$  relativamente a  $\mathbb{P}$  no espaço de parâmetros de controle.  $\mathcal{M}_r^{\mathbb{H}\mathbb{P}-}$  e  $\mathcal{M}_r^{\mathbb{H}\mathbb{P}+}$  caracterizam respectivamente as superfícies de perda e ganho de estabilidade de  $\mathbb{H}$  quando se incrementa  $\mathcal{M}_r$ .

As superfícies que delimitam a região de estabilidade de  $\mathbb{P}$  no espaço de parâmetros de controle são determinadas minimizando  $F_r$  no espaço dos parâmetros de configuração e são caracterizadas pelas forças magnéticas mais baixa ( $\mathcal{M}_r^{\mathbb{P}^-}$ ) e mais alta ( $\mathcal{M}_r^{\mathbb{P}^+}$ ) a que é possível encontrar  $\mathbb{P}$ .  $\mathcal{M}_r^{\mathbb{H}^-}$  é a força magnética mais baixa que ainda permite que  $\mathbb{H}$  seja estável.  $\mathcal{M}_r^{\mathbb{H}^-}$  foi determinada a partir das equações diferenciais.

Dependendo dos valores de  $\mathcal{M}_r^{\mathbb{U}^{\mathbb{P}}}$ ,  $\mathcal{M}_r^{\mathbb{H}^{\mathbb{P}^-}}$ ,  $\mathcal{M}_r^{\mathbb{H}^{\mathbb{P}^+}}$  e  $\mathcal{M}_r = \mathcal{M}_r^{\mathbb{P}^+}$  são possíveis diversos comportamentos na subida da força magnética. Quando  $\mathcal{M}_r^{\mathbb{U}^{\mathbb{P}}} < 1$ ,  $\mathbb{U}$  perde estabilidade para  $\mathbb{P}$  a  $\mathcal{M}_r = \mathcal{M}_r^{\mathbb{U}^{\mathbb{P}}}$ . Quando  $\mathcal{M}_r^{\mathbb{U}^{\mathbb{P}}} = 1$ ,  $\mathbb{U}$  perde estabilidade para  $\mathbb{H}$  a  $\mathcal{M}_r = 1$  (transição de Fréedericksz usual).  $\mathbb{H}$  perde estabilidade para  $\mathbb{P}$  a  $\mathcal{M}_r = \mathcal{M}_r^{\mathbb{H}^{\mathbb{P}^-}}$ .

Na Figura 2.21 estão contidos gráficos das funções (2.71) e (2.72), respectivamente com linhas a traço interrompido e a cheio, a  $\mathcal{M}_r = 1$  para seis valores do ângulo de inclinação.

As linhas separam regiões de diferente comportamento, classificadas de acordo com a Tabela 2.1. A região  $A_2$  reproduz os resultados de Allender *et al.* [2].

O campo crítico para a transição  $\mathbb{U}$ - $\mathbb{H}$  (através de  $\mathbb{P}$ ) em  $\mathbb{C}_2$  é inferior ao campo crítico de Fréedericksz.

Tanto transições  $\mathbb{U}$ - $\mathbb{P}$  directas contínuas como descontínuas foram encontradas em  $\mathbb{C}_1$ , pois tanto o campo magnético que torna  $\mathbb{U}$  instável face a  $\mathbb{P}$  pode ser respectivamente igual ou superior ao campo magnético que torna  $\mathbb{P}$  estável.

Os parâmetros de configuração em  $\mathbb{H}$  encontrados por minimização fornecem amplitudes de distorção máxima e densidades de energia média que diferem menos de 1% da solução das equações de Euler-Lagrange na maior parte da gama de  $\mathcal{K}_{3/1}$  explorada (ver [32] em §H).

### 2.3.9 GEOMETRIA DE TORÇÃO-FLEXÃO

Nesta geometria (ver figura 2.23) torna-se necessário acrescentar um número variável de termos das séries de Fourier para a dependência em  $z$  do *Ansatz*. A expressão do *Ansatz*



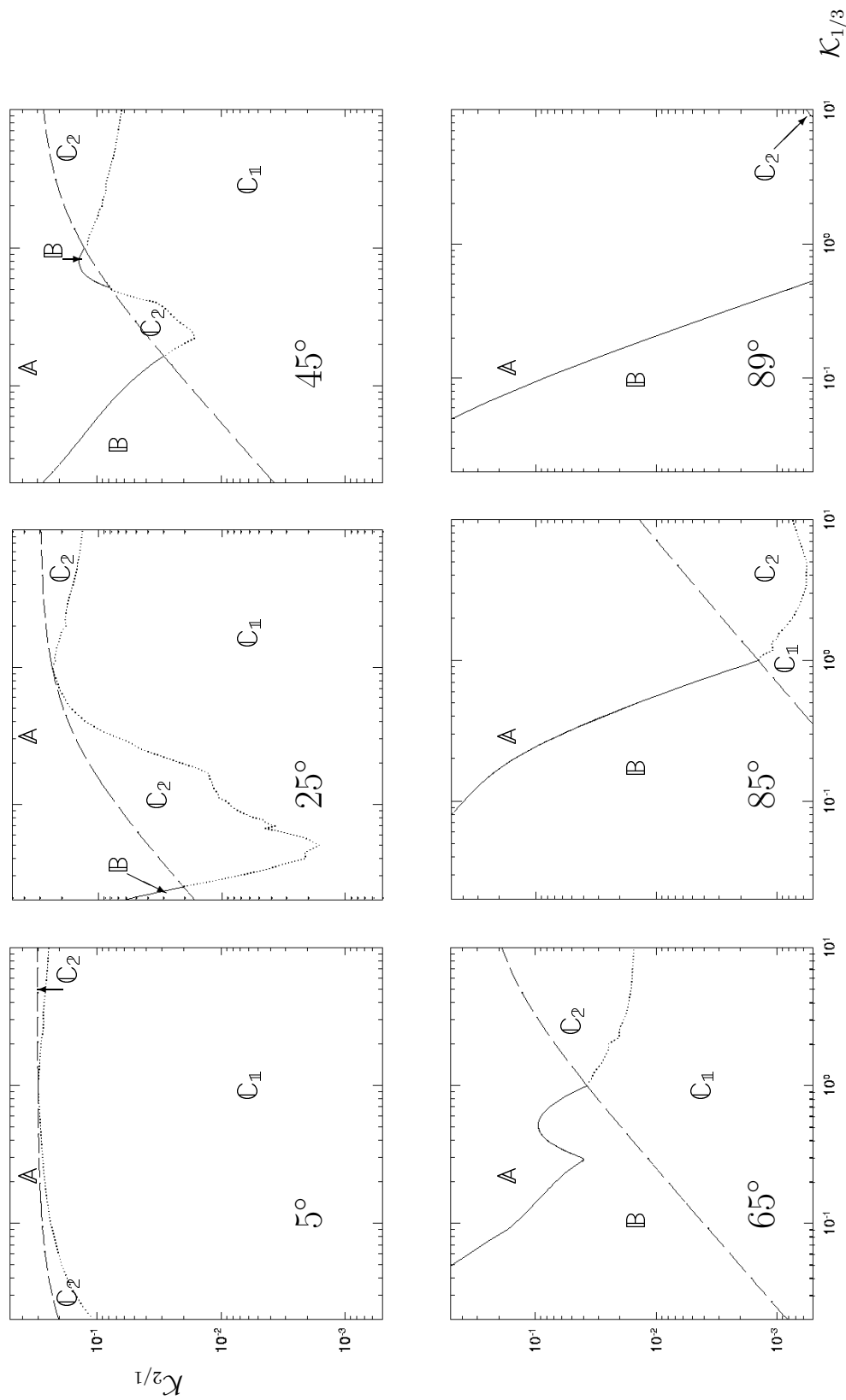


Figura 2.21: Diagramas de configuração a  $\mathcal{M}_r = 1$  com regiões classificadas de acordo com a tabela 2.1. A região  $\mathbb{C}_3$  constitui uma fracção da região  $\mathbb{C}_1$ . A região A é a união das regiões  $\mathbb{A}_1$  e  $\mathbb{A}_2$ , sendo caracterizada pela transição U-H a  $\mathcal{M}_r = 1$ . O ângulo de inclinação  $\gamma$  encontra-se indicado em cada um dos diagramas. Todos os diagramas representam as mesmas gamas dos rácios de constantes elásticas.

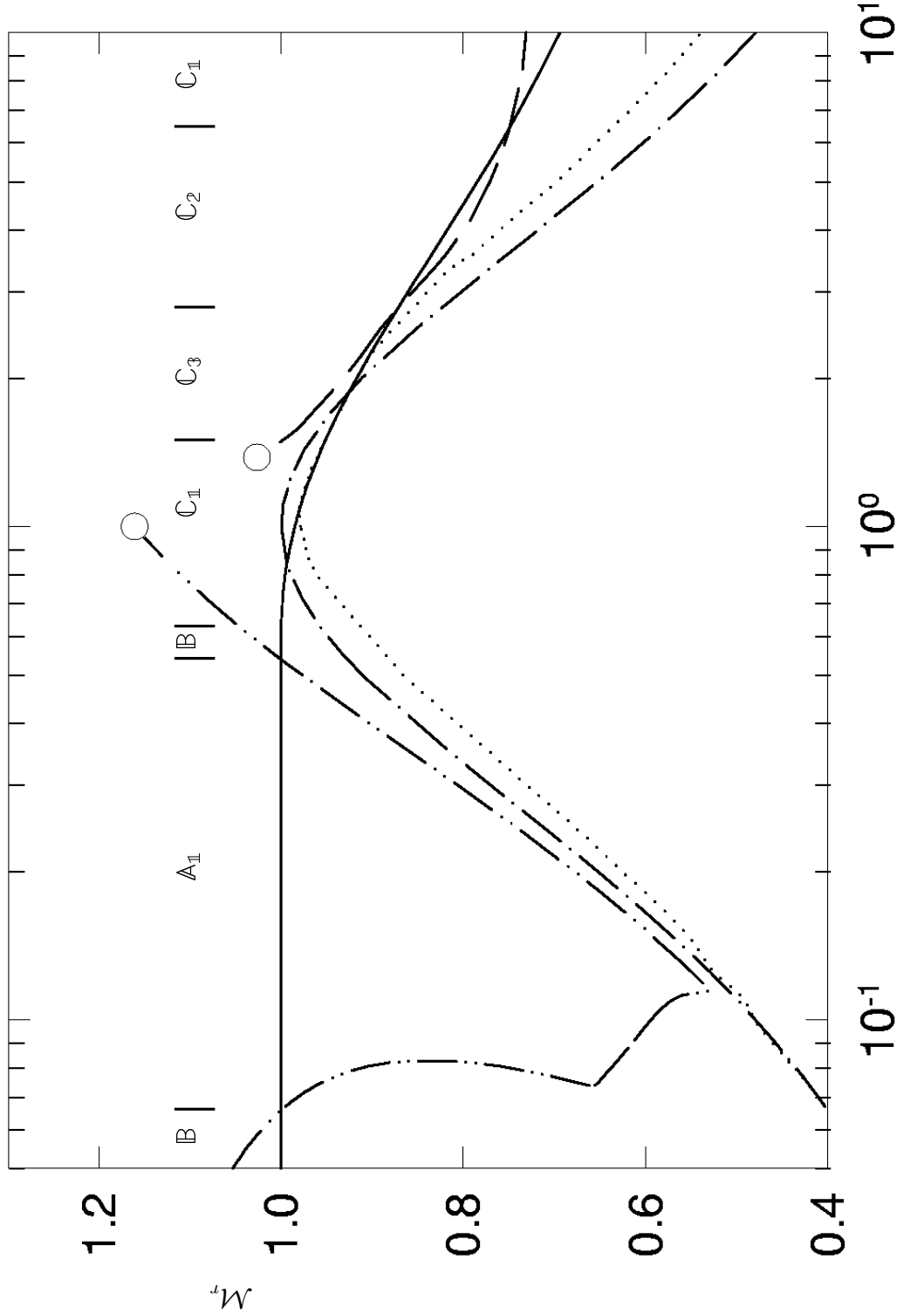


Figura 2.22: Diagrama de configuração para uma inclinação de  $45^\circ$  com  $\mathcal{K}_{2/1} = 0,09$ . Os círculos marcam os valores limite de  $\mathcal{K}_{1/3}$  para além dos quais não se encontrou continuidade das linhas correspondentes até  $\mathcal{M}_r = 1,4$ . —  $\mathbb{U}\mathbb{P}$ ; - - -  $\mathbb{U}\mathbb{P}$ ; - - - -  $\mathbb{H}\mathbb{P}+$  coincidente com  $\mathbb{P}+$ ; - - - -  $\mathbb{H}-$  coincidente com  $\mathbb{H}\mathbb{P}-$  para  $\mathcal{K}_{1/3} < 1$ ;  $\cdots\cdots\mathbb{P}-$ ;  $-\cdots-\mathbb{P}+$ .

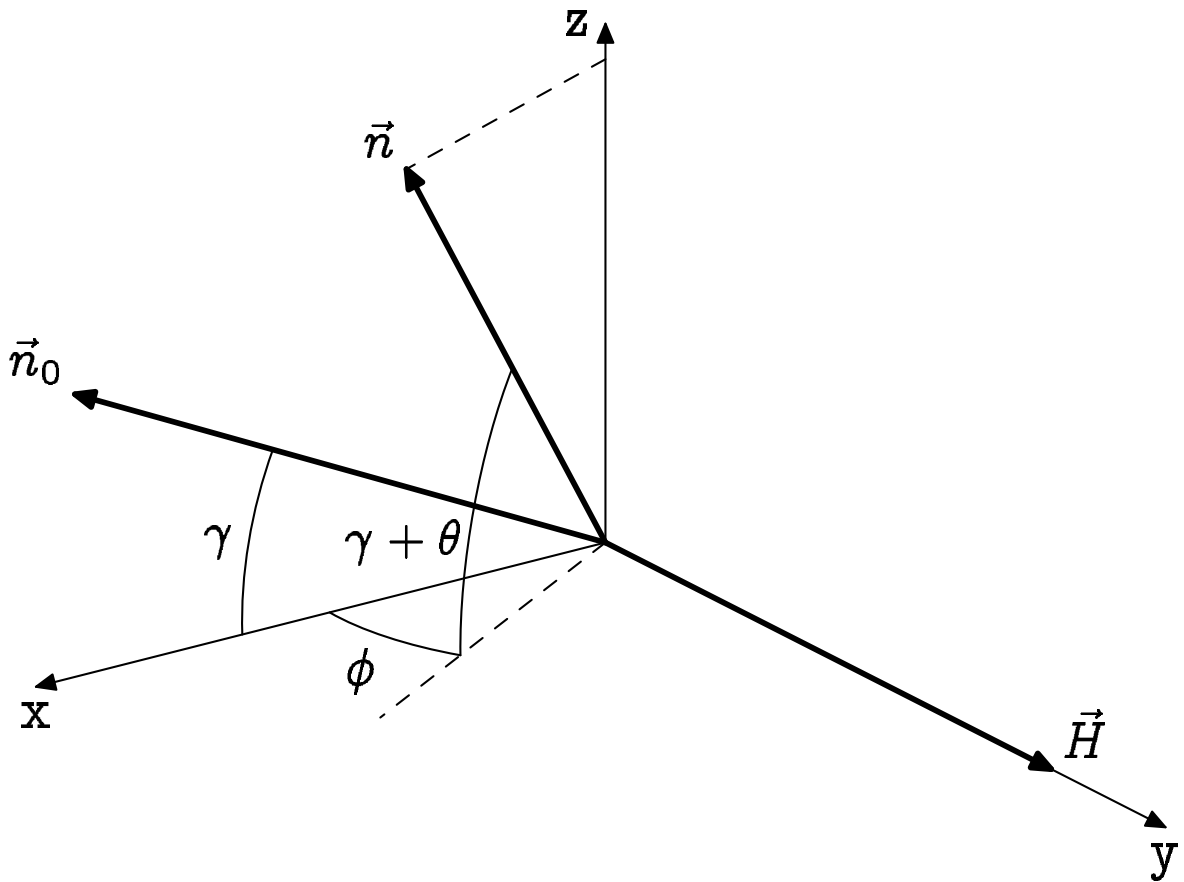


Figura 2.23: Referencial para as transições de Fréedericksz periódicas na geometria de torção-flexão. Não estão representadas as fronteiras planas em  $z = 0$  e  $z = d_c$ .

fica simplificada se deslocarmos a origem do referencial para uma das fronteiras.

$$\begin{cases} \theta = \Delta\Theta + \sum_{j=1}^{N_0} \Theta_{0j} \sin\left(j \frac{\pi}{d_c} z\right) \\ \phi = \Delta\Phi + \sum_{j=1}^{N_0} \Phi_{0j} \sin\left(j \frac{\pi}{d_c} z\right) \end{cases} \quad (2.73)$$

onde o índice  $j$  é sempre ímpar, para manter a simetria e respeitar as condições fronteira, e onde se tem

$$\begin{aligned} \Delta\Theta &= \cos(q_x x + q_y y) \sum_{k=1}^{N_1} \Theta_{1k} \sin\left(k \frac{\pi}{d_c} z\right) \\ &\quad + \sin(q_x x + q_y y) \sum_{k=1}^{N_1} \Theta_{2k} \sin\left(k \frac{\pi}{d_c} z\right) \\ \Delta\Phi &= \cos(q_x x + q_y y) \sum_{k=1}^{N_1} \Phi_{1k} \sin\left(k \frac{\pi}{d_c} z\right) \\ &\quad + \sin(q_x x + q_y y) \sum_{k=1}^{N_1} \Phi_{2k} \sin\left(k \frac{\pi}{d_c} z\right) \end{aligned}$$

A possibilidade de ajustar o número de termos das séries de Fourier permite descrever a distorção homogénea do campo do director com uma incerteza pré-especificada, sendo

Tabela 2.1: Definições das regiões de diferentes comportamentos na subida da intensidade da força magnética. As transições ocorrem quando a força magnética reduzida atinge os valores indicados acima das setas ( $\longrightarrow$ ).

Nome	Transições	Condições
$A_1$	$\mathbb{U} \xrightarrow{1} \mathbb{H}$	$\mathcal{M}_r^{\text{HP}+} < 1, \mathcal{M}_r^{\text{UP}} \geq 1$
$A_2$	$\mathbb{U} \xrightarrow{1} \mathbb{H} \xrightarrow{\mathcal{M}_r^{\text{HP}-}} \mathbb{P} \left( \xrightarrow{\mathcal{M}_r^{\text{P}+}} \mathbb{H} \right)$	$\mathcal{M}_r^{\text{UP}} \geq 1, \mathcal{M}_r^{\text{HP}-} > 1$
$B$	$\mathbb{U} \xrightarrow{1} \mathbb{H} \xrightarrow{1} \mathbb{P} \left( \xrightarrow{\mathcal{M}_r^{\text{P}+}} \mathbb{H} \right)$	$\mathcal{M}_r^{\text{HP}-} < \mathcal{M}_r^{\text{UP}} \geq 1 < \mathcal{M}_r^{\text{HP}+}$
$C_1$	$\mathbb{U} \xrightarrow{\mathcal{M}_r^{\text{UP}}} \mathbb{P} \left( \xrightarrow{\mathcal{M}_r^{\text{P}+}} \mathbb{H} \right)$	$\mathcal{M}_r^{\text{UP}} < 1, \mathcal{M}_r^{\text{UP}} < \mathcal{M}_r^{\text{P}+}$
$C_2$	$\mathbb{U} \xrightarrow{\mathcal{M}_r^{\text{UP}}} \mathbb{P} \xrightarrow{\mathcal{M}_r^{\text{UP}}} \mathbb{H}$	$\mathcal{M}_r^{\text{P}+} < \mathcal{M}_r^{\text{UP}} < 1$
$C_3$	$\mathbb{U} \xrightarrow{\mathcal{M}_r^{\text{UP}}} \mathbb{P} \xrightarrow{\mathcal{M}_r^{\text{P}+}} \mathbb{H}$	$\mathcal{M}_r^{\text{UP}} < \mathcal{M}_r^{\text{P}+} < 1$

por isso equivalente à resolução das equações diferenciais mas com a vantagem duma acrescida robustez numérica. Assim, temos o director tal como em (2.67), temos o versor do campo magnético  $\hat{h} = \hat{y}$  e temos as amplitudes angulares

$$\Upsilon^{\text{H}} = \{\Theta_{0j}, \Phi_{0j}\} \quad j = 1, 3, \dots, N_0 \quad (2.74)$$

$$\Upsilon^{\text{P}} = \{\Theta_{1k}, \Phi_{1k}, \Theta_{2k}, \Phi_{2k}\} \quad k = 1, 2, \dots, N_1 \quad (2.75)$$

Usamos a energia adimensionalizada

$$F_r = \frac{F}{\mathcal{M}_{tf}^* q_z^2} \quad (2.76)$$

O método decorre como em §2.3.8 excepto no que diz respeito aos ajustamentos de  $N_1$  e  $N_0$ .  $N_1$  é escolhido tal que sendo incrementado, o valor de  $\mathcal{D}_{\min}$  varia menos do que 0,5% e  $N_0$  é escolhido tal que sendo incrementado de 2 a energia do mínimo correspondente a uma distorção homogénea varia menos do que 0,5%. O valor da energia, correspondente à distorção homogénea, calculada numericamente a partir das equações diferenciais também se encontra dentro desta margem.

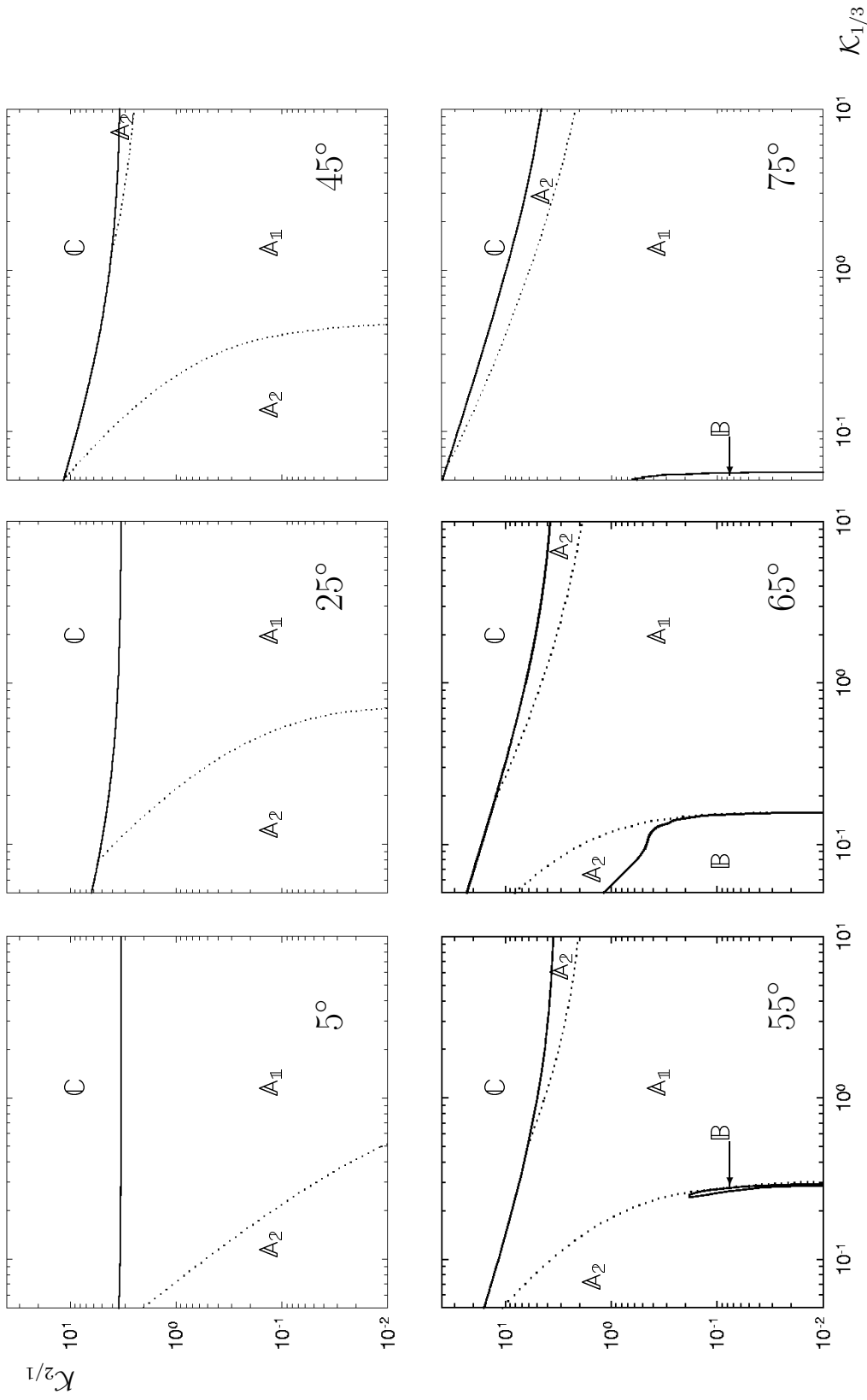


Figura 2.24: Diagramas de configuração a  $M_r = 1$  com regiões classificadas de acordo com a tabela 2.1 mas com a condição  $M_r^{H^-} < 1$  acrescentada a  $A_2$ . A transição U-Hé contínua na região  $A_1$  e descontínua na região  $A_2$ .  $A_1$  e  $A_2$  estão separadas por uma linha de pontos tricríticos pois o plano  $M_r = 1$  constitui uma fronteira de transição U-H. Em C ocorre uma transição U-P a  $M_r < 1$ . O ângulo de inclinação  $\gamma$  encontra-se indicado em cada um dos diagramas. Todos os diagramas representam as mesmas gamas dos raios de constantes elásticas.

# CAPÍTULO 3

## MODELOS DINÂMICOS

*Paulo majora canamus*

No estudo do comportamento dinâmico do director baseamo-nos nas equações da nematodinâmica apresentadas em §1.2.1.1. Tal como vimos em §2 que configurações periódicas podem minimizar a energia livre para rácios de constantes elásticas suficientemente diferentes de 1, veremos agora que configurações periódicas podem minimizar o tempo de reorientação do campo do director sob certas condições.

As equações da nematodinâmica acoplam a orientação  $\vec{n}$  e o fluxo de material  $\vec{v}$ . As reorientações podem implicar fluxo e os fluxos podem implicar reorientação. Uma analogia possível para este acoplamento é um moínho de água em que a posição da roda do moínho corresponde à orientação do director e o movimento da água corresponde ao fluxo de material. Esta analogia pode ser aperfeiçoada se a roda do moínho tiver uma forma ovalizada. Assim o efeito recíproco entre a rotação e o fluxo também depende da orientação. Tal como nos nemáticos.

### 3.1 VISCOSIDADES

Podemos relacionar os coeficientes de viscosidade de Leslie ( $\alpha_i$ ) com viscosidades experimentalmente mensuráveis (viscosidades experimentais) utilizando o seguinte sistema

de equações

$$\left\{ \begin{array}{l} \gamma_1 = \alpha_3 - \alpha_2 \\ \nu_1 = \frac{1}{2}(\alpha_1 + \alpha_4 + \alpha_5 + \alpha_6) \\ \eta_a = \frac{1}{2}\alpha_4 \\ \eta_b = \frac{1}{2}(\alpha_3 + \alpha_4 + \alpha_6) \\ \eta_c = \frac{1}{2}(\alpha_4 + \alpha_5 - \alpha_2) \end{array} \right. \quad (3.1)$$

ou vice-versa (introduzindo a relação de Parodi de §1.2.2.2)

$$\left\{ \begin{array}{l} \alpha_1 = 2\nu_1 + 2\eta_a - 2\eta_b - 2\eta_c + \gamma_1 \\ \alpha_2 = -\frac{\gamma_1}{2} + \frac{\eta_b}{2} - \frac{\eta_c}{2} \\ \alpha_3 = +\frac{\gamma_1}{2} + \frac{\eta_b}{2} - \frac{\eta_c}{2} \\ \alpha_4 = 2\eta_a \\ \alpha_5 = \frac{\eta_b}{2} - 2\eta_a + \frac{3\eta_c}{2} - \frac{\gamma_1}{2} \\ \alpha_6 = \frac{\eta_c}{2} - 2\eta_a + \frac{3\eta_b}{2} - \frac{\gamma_1}{2} \end{array} \right. \quad (3.2)$$

De acordo com (1.58), podemos ainda acrescentar que

$$\gamma_2 = \eta_b - \eta_c \quad (3.3)$$

Os coeficientes de viscosidade de Leslie  $\alpha_i$  podem ser positivos ou negativos mas as viscosidades experimentais:

- Viscosidade rotacional  $\gamma_1$  (1.57);
- Viscosidade elongacional  $\nu_1$ ; e
- Viscosidades de Miesowicz (§1.2.2.1)  $\eta_a$ ,  $\eta_b$  e  $\eta_c$ ,

são sempre positivas. De qualquer modo as viscosidades que tornam as equações mais compactas são  $\alpha_1$ ,  $\gamma_1$ ,  $\eta_a$ ,  $\eta_b$  e  $\eta_c$ . Serão estas que utilizaremos.



## 3.2 EQUAÇÕES DA NEMATODINÂMICA PARA SITUAÇÕES PARTICULARES DE INTERESSE NESTE TRABALHO

Começamos por reescrever a equação do director (1.49) eliminando a tensão de orientação  $\zeta$

$$\varepsilon_{ijk} (\mathcal{H}_j - g'_j) n_k = 0_i \quad (3.4)$$

À equação da velocidade (1.28) aplicamos rotacionais para eliminar a pressão  $p$ , pois o rotacional do gradiente de um campo escalar é nulo. Considere-se também que  $\Pi_i \equiv \rho \dot{v}_i$  e que  $\Sigma_i \equiv \sigma_{ij,j}$ .

$$\begin{bmatrix} \frac{\partial \Pi_z}{\partial y} - \frac{\partial \Pi_y}{\partial z} \\ \frac{\partial \Pi_x}{\partial z} - \frac{\partial \Pi_z}{\partial x} \\ \frac{\partial \Pi_y}{\partial x} - \frac{\partial \Pi_x}{\partial y} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{\partial \Sigma_z}{\partial y} - \frac{\partial \Sigma_y}{\partial z} \\ \frac{\partial \Sigma_x}{\partial z} - \frac{\partial \Sigma_z}{\partial x} \\ \frac{\partial \Sigma_y}{\partial x} - \frac{\partial \Sigma_x}{\partial y} \end{bmatrix} \quad (3.5)$$

Agora considere-se que não há variações na direcção  $y$  e que a velocidade não tem componente em  $z$ , ou seja,  $\Pi_z = 0$ .

$$\begin{bmatrix} -\frac{\partial \Pi_y}{\partial z} \\ \frac{\partial \Pi_x}{\partial z} \\ \frac{\partial \Pi_y}{\partial x} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -\frac{\partial \Sigma_y}{\partial z} \\ \frac{\partial \Sigma_x}{\partial z} - \frac{\partial \Sigma_z}{\partial x} \\ \frac{\partial \Sigma_y}{\partial x} \end{bmatrix} \quad (3.6)$$

Se a velocidade só tiver a componente  $y$  então obtém-se

$$\begin{bmatrix} \frac{\partial \Pi_y}{\partial z} \\ \frac{\partial \Pi_y}{\partial x} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{\partial \Sigma_y}{\partial z} \\ \frac{\partial \Sigma_y}{\partial x} \end{bmatrix} \quad (3.7)$$

Voltando um pouco atrás, verificamos que a equação da velocidade (1.28) traduz um equilíbrio de forças. A densidade de força de inércia  $\rho \dot{v}_i$  e a densidade de força elástica

$\sigma_{ij,j}^0$  são, de maneira geral, desprezáveis face à densidade de força dissipativa  $\sigma'_{ij,j}$ . Assim admitimos que  $\Pi_i = 0_i$  e concluímos, com base em (3.7), que  $\Sigma_y = C^{te}$ . Como o resultado tem que ser invariante para rotações de  $180^\circ$

$$\Sigma_y(z) = -\Sigma_y(-z) \quad (3.8)$$

a constante tem que ser nula, ou seja,  $\sigma'_{yi,i} + \sigma_{yi,i}^0 = 0$ . Se a velocidade tiver componentes também em  $x$  então obtemos

$$\frac{\partial \Sigma_x}{\partial z} = \frac{\partial \Sigma_z}{\partial x} \quad (3.9)$$

que, pelas razões anteriores, permite concluir que

$$\sigma_{ji,i} = 0_j \quad (3.10)$$

Acrescentando que é razoável desprezar a parte elástica do tensor dos esforços obtemos a equação da velocidade

$$\sigma'_{ji,i} = 0_j \quad (3.11)$$

No entanto lembremos que a equação da velocidade (3.11) e a equação do director (3.4) são válidas apenas pressupondo que

- $\rho \dot{v}_i \approx 0_i$
- $\rho_1 \ddot{n}_i \approx 0_i$
- $\vec{v}$  é independente de  $y$  e não tem componente em  $z$

No caso particular em que a velocidade só tem a componente em  $y$  usamos a equação da velocidade

$$\sigma'_{yj,j} = 0 \quad (3.12)$$

e a equação do director (1.29)

$$\varepsilon_{ijk} (\mathcal{H}_j - g'_j) n_k = 0_i \quad (3.13)$$

de que é suficiente a componente  $i = z$ . As outras componentes tornam-se identicamente nulas na ausência de variações em  $z$ . Este caso pode corresponder à geometria de torção pura da figura 2.1 se  $\alpha = 0$ , ou da figura 2.7 com  $\beta = 0$  e  $\psi = \pi/2$  rad se  $\alpha \neq 0$ , onde se tem o director dado por (2.2), o campo magnético dado por

$$\left\{ \begin{array}{l} H_x = H \sin \alpha \\ H_y = H \cos \alpha \\ H_z = 0 \end{array} \right. \quad (3.14)$$

e a velocidade dada por

$$\left\{ \begin{array}{l} v_x = 0 \\ v_y = v(t, x, z) \\ v_z = 0 \end{array} \right. \quad (3.15)$$

Expandindo a equação da velocidade (3.12) e a do director (3.13) obtemos, respectivamente,

$$\begin{aligned}
0 &= 2S_\phi C_\phi (\eta_c - \eta_b) \phi_{,t} \phi_{,x} \\
&+ \left( C_\phi^2 (\eta_b - \eta_c) + \frac{1}{2} (\eta_c - \eta_b - \gamma_1) \right) \phi_{,tx} \\
&+ 2S_\phi C_\phi (2C_\phi^2 \alpha_1 - \alpha_1 - \eta_c + \eta_b) \phi_{,x} v_{,x} \\
&+ (\eta_b + C_\phi^2 (\alpha_1 - C_\phi^2 \alpha_1 - \eta_b + \eta_c)) v_{,xx} \\
&+ (C_\phi^2 \eta_a + S_\phi^2 \eta_b) v_{,zz} \\
&+ 2S_\phi C_\phi (\eta_b - \eta_a) v_{,z} \phi_{,z}
\end{aligned} \tag{3.16}$$

$$\begin{aligned}
0 &= K_2 \phi_{,zz} \\
&- \gamma_1 \phi_{,t} \\
&+ (C_\phi^2 K_3 + S_\phi^2 K_1) \phi_{,xx} \\
&+ S_\phi C_\phi (K_1 - K_3) \phi_{,x}^2 \\
&+ \left( C_\phi^2 (\eta_c - \eta_b) + \frac{1}{2} (\eta_b - \eta_c + \gamma_1) \right) v_{,x} \\
&+ \left( \frac{1}{2} (2C_\phi^2 - 1) \sqrt{1 - \mathcal{A}^2} + S_\phi C_\phi \mathcal{A} \right) \mathcal{M} q_z^2
\end{aligned} \tag{3.17}$$

onde

$$S_\phi \equiv \sin \phi \tag{3.18}$$

$$C_\phi \equiv \cos \phi \tag{3.19}$$

e onde o último termo se pode simplificar de acordo com a igualdade seguinte:

$$\frac{1}{2} (2C_\phi^2 - 1) \sqrt{1 - \mathcal{A}^2} + S_\phi C_\phi \mathcal{A} = \frac{1}{2} \sin[2(\phi + \alpha)]$$

Note-se ainda que  $\phi_{,x}^2$  quer dizer quadrado da derivada parcial de  $\phi$  em ordem a  $x$ . Embora as equações (3.16) e (3.17) se refiram a uma situação já bastante restritiva, ainda são suficientemente gerais para suportar diversas concretizações.

### 3.3 REORIENTAÇÃO HOMOGÊNEA

A reorientação homogênea tem lugar sem fluxo de material, ou seja, com  $\vec{v}(t, x, z) = 0$ .

Se, adicionalmente, impusermos invariância em  $x$  obtemos, a partir de (3.17),

$$\begin{aligned} 0 &= K_2 \phi_{,zz} \\ &- \gamma_1 \phi_{,t} \\ &+ \frac{1}{2} \sin[2(\phi + \alpha)] \mathcal{M} q_z^2 \end{aligned} \quad (3.20)$$

Façamos agora a seguinte mudança de variável

$$\phi = \vartheta - \alpha \quad (3.21)$$

Obtemos

$$\begin{aligned} 0 &= K_2 \vartheta_{,zz} \\ &- \gamma_1 \vartheta_{,t} \\ &+ \frac{1}{2} \sin(2\vartheta) \mathcal{M} q_z^2 \end{aligned} \quad (3.22)$$

que se pode ainda simplificar dividindo-se por  $\mathcal{M} q_z^2$

$$0 = \xi_2^2 \vartheta_{,zz} - \tau \vartheta_{,t} + \frac{1}{2} \sin(2\vartheta) \quad (3.23)$$

onde  $\xi_2$  é denominado comprimento de coerência magnética [20] e  $\tau$  é um tempo de reorientação que depende da intensidade do campo magnético mas não depende da distância entre as fronteiras.

$$\xi_2^2 = \frac{K_2}{\chi_a H^2} = \frac{\mathcal{M}_t^*}{\mathcal{M} q_z^2} = (\mathcal{M}_r q_z^2)^{-1} \quad (3.24)$$

$$\tau = \frac{\gamma_1}{\chi_a H^2} = \frac{\gamma_1}{\mathcal{M} q_z^2} \quad (3.25)$$

Continuamos a simplificar substituindo  $\frac{1}{2} \sin(2\vartheta)$  em (3.23) pela sua expansão em série até à terceira ordem

$$0 = \xi_2^2 \vartheta_{,zz} - \tau \vartheta_{,t} + \vartheta - \frac{2}{3} \vartheta^3 \quad (3.26)$$

Admitindo as condições fronteira  $\vartheta(z = \pm d_c/2) = 0$  uma solução geral é

$$\vartheta = \sum_{l=0}^{\infty} C_l(t) \cos[(2l+1)q_z z] \quad (3.27)$$

Simplificamos mais uma vez ao desprezar as harmónicas

$$\vartheta = C(t) \cos(q_z z) \quad (3.28)$$

e obtendo

$$0 = (1 - \mathcal{M}_r^{-1}) C - \frac{1}{2} C^3 - \tau C_{,t} \quad (3.29)$$

cuja solução é [13, §3.8.1]

$$C_r(t) = C_r(\infty) \left\{ 1 + [C_r^2(\infty) - 1] e^{-2\frac{t}{\tau_{\mathbb{H}}}} \right\}^{-\frac{1}{2}} \quad (3.30)$$

em que

$$C_r(t) = \frac{C(t)}{C(0)} \quad (3.31)$$

$$\tau_{\mathbb{H}} = \frac{\gamma_1}{\chi_a (H^2 - H_t^{*2})} = \frac{\tau_2}{\mathcal{M}_r - 1} \quad (3.32)$$

$$\tau_2 = \frac{\gamma_1}{K_2 q_z^2} \quad (3.33)$$

sendo  $\tau_{\mathbb{H}}$  o tempo característico da reorientação homogénea ao impôr subitamente o campo magnético e  $\tau_2$  o tempo característico de recuperação da orientação ao retirar o campo magnético. Isto pode ser verificado anulando  $\mathcal{M}$  na equação (3.20). Note-se ainda que

$$\tau_{\mathbb{H}}^{-1} = \tau^{-1} - \tau_2^{-1} \quad (3.34)$$

A solução (3.30) encontra-se representada na figura 3.1. Vê-se que a amplitude  $C(t)$  da distorção aumenta exponencialmente até se aproximar do máximo  $C(\infty)$ . Depois entra em patamar. O tempo necessário para atingir o patamar é dependente de  $C(0)$ . Estas são características da generalidade das reorientações magnéticas.

Regressemos à equação (3.20) mas não façamos uma mudança de variável nem uma expansão até à terceira ordem nem desprezemos as harmónicas. Em vez disso, linearizemos. Esta simplificação permite-nos obter o perfil da distorção entre as fronteiras.

$$\gamma_1 \phi_{,t} = K_2 \phi_{,zz} + \left[ \frac{1}{2} \sin(2\alpha) + \cos(2\alpha) \phi \right] \mathcal{M} q_z^2 \quad (3.35)$$

Supondo  $\phi(t, z) = \sum \phi(t) \phi(z)$  e tendo em conta as condições fronteira  $\phi(0, z) = 0$  e  $\phi(t, \pm d_c/2) = 0$ , esta equação tem soluções dadas por [10]

$$\phi = A \times \left( 1 - B - \sum_{l=0}^{\infty} C_l \times D_l \times E_l \right) \quad (3.36)$$

onde

$$A \equiv \frac{1}{2} \tan(2\alpha)$$

$$B \equiv \frac{\cosh(H_r z_r)}{\cosh(H_r \frac{\pi}{2})}$$

$$C_l \equiv \frac{(-1)^l}{2l+1} \frac{4H_r^2}{\pi [(2l+1)^2 + H_r^2]}$$

$$D_l \equiv \cos[(2l+1)z_r]$$

$$E_l \equiv e^{-\frac{(2l+1)^2 + H_r^2}{\tau_2} t}$$

$$H_r = \sqrt{-\mathcal{M}_r \cos(2\alpha)}$$

$$z_r = q_z z = \frac{\pi}{d_c} z$$

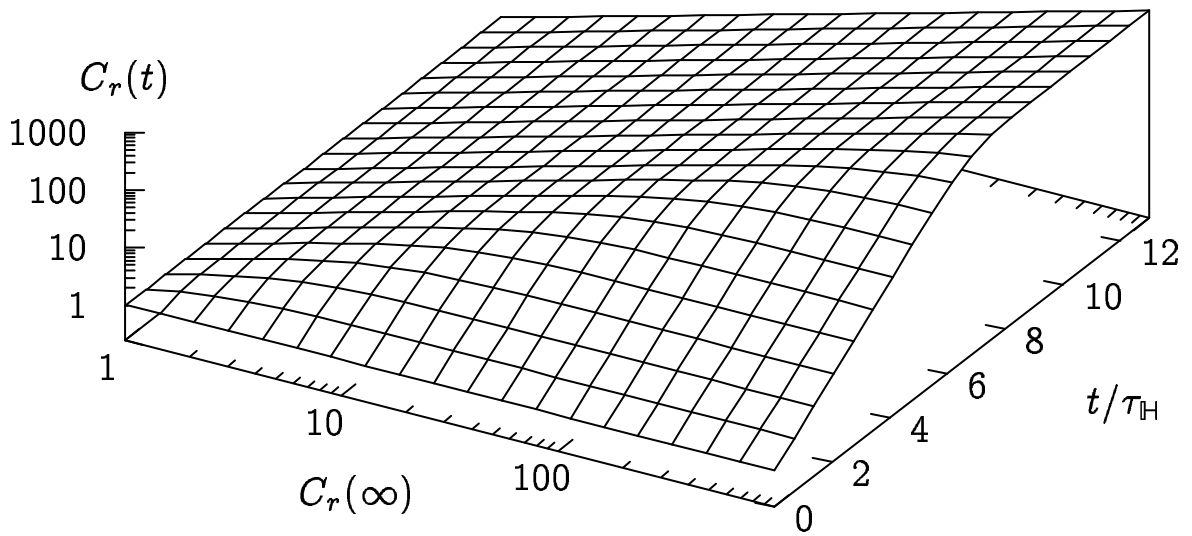


Figura 3.1: Representação da equação 3.30.

em que sendo  $H_r$  real, a expressão  $H_r = \sqrt{-\mathcal{M}_r \cos(2\alpha)}$  implica  $|\alpha| > \pi/4$ . De facto, quando o ângulo entre  $\vec{H}$  e  $\vec{n}_0$  é próximo de  $\pi/2$  rad a reorientação não é homogénea. Veremos isto mais à frente. O comportamento genérico de (3.36) encontra-se representado na figura 3.2. Vê-se que o perfil  $\phi(z)$  é inicialmente direito mas arredonda ao longo do tempo. Podemos perceber intuitivamente as causas deste efeito. À medida que a amplitude da distorção aumenta também a influência das rígidas condições fronteira se propaga mais para o interior da célula nemática. O arredondamento do perfil  $\phi(z)$  ao longo do tempo também pode ser visto como função da força magnética. A equação (3.32) mostra que o incremento da força magnética acelera o processo de reorientação. No entanto, quanto maior for  $\mathcal{M}$  menos arredonda o perfil.

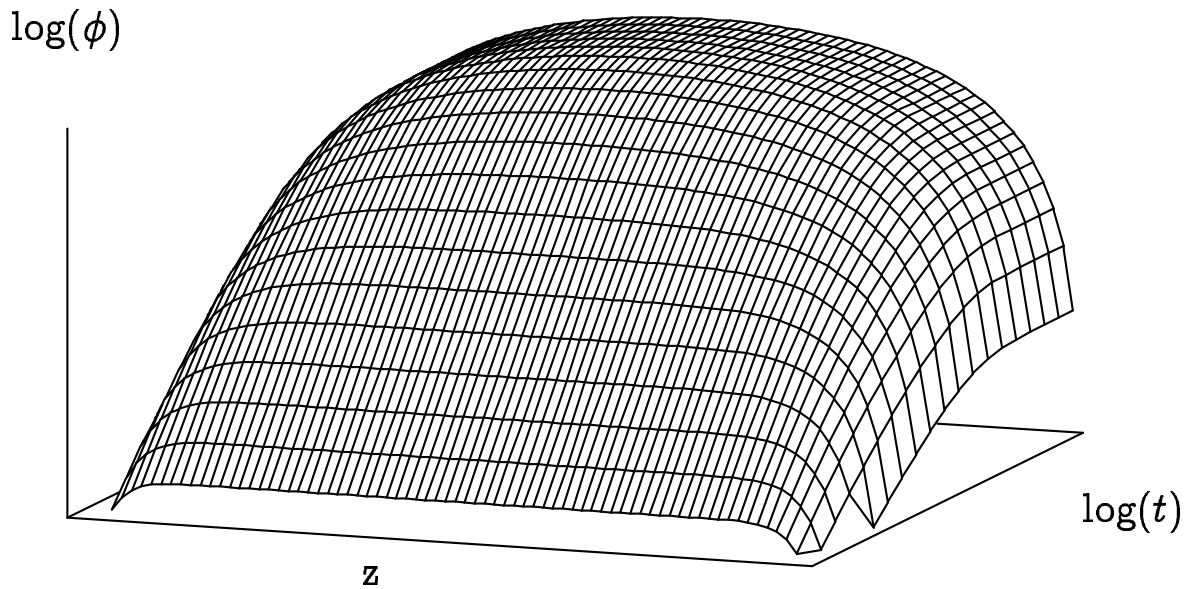


Figura 3.2: Gráfico exemplificativo da forma da equação 3.36.

### 3.4 TEMPOS LONGOS

Uma das concretizações que as equações (3.16) e (3.17) admitem consiste em anular a velocidade e todas as derivadas temporais. Assim, descrevemos o estado que se atinge após o transiente de reorientação. Se, adicionalmente, considerarmos invariância em  $z$



e  $\alpha = 0$ , obtemos

$$\begin{aligned}
0 &= (C_\phi^2 K_3 + S_\phi^2 K_1) \phi_{,xx} \\
&+ S_\phi C_\phi (K_1 - K_3) \phi_{,x}^2 \\
&+ S_\phi C_\phi \chi_a H^2
\end{aligned} \tag{3.37}$$

Colocamos esta equação na forma adimensional multiplicando por  $\xi_1^2$  e efectuando a seguinte mudança de variável

$$x = \xi_1 x_r = \sqrt{\frac{K_1}{\chi_a H^2}} x_r \tag{3.38}$$

Assim, ficamos com

$$0 = [1 + C_\phi^2 (\mathcal{K}_{3/1} - 1)] \phi_{,x_r x_r} + S_\phi C_\phi [1 - (\mathcal{K}_{3/1} - 1) \phi_{,x_r}^2] \tag{3.39}$$

Esta equação foi resolvida numericamente sob diversas condições fronteira [12]. Verificou-se que as condições

$$\phi(0) = 0 \tag{3.40}$$

$$\phi_{,x_r}(0) = \frac{1}{\sqrt{\mathcal{K}_{3/1}}} \tag{3.41}$$

impõem soluções que respeitam

$$\phi(-\infty) = -\frac{\pi}{2} \tag{3.42}$$

$$\phi(\infty) = \frac{\pi}{2} \tag{3.43}$$

No caso particular em que  $\mathcal{K}_{3/1} = 1$  Helfrich [47] determinou a seguinte solução analítica de (3.39)

$$\phi = 2 \arctan(e^{x_r}) - \frac{\pi}{2} \tag{3.44}$$

Tendo em conta (3.41), tomemos a seguinte expressão como aproximação da solução geral

$$\phi = 2 \arctan\left(e^{\frac{x_r}{\sqrt{\mathcal{K}_{3/1}}}}\right) - \frac{\pi}{2} \tag{3.45}$$

Podemos observar que

$$\frac{x_r}{\sqrt{\mathcal{K}_{3/1}}} = \frac{x}{\xi_3} \quad (3.46)$$

Por outro lado, o campo do director representado na figura 3.3 mostra que a solução (3.45) corresponde a uma região que separa dois domínios de orientação equivalente. A este tipo de regiões dá-se o nome de parede. No caso presente trata-se de uma parede de afunilamento-flexão. A sua espessura é proporcional a  $\sqrt{K_3}$  e inversamente proporcional a  $H$ . Os resultados da referência [12] mostram também que a equação (3.39) suporta soluções periódicas.

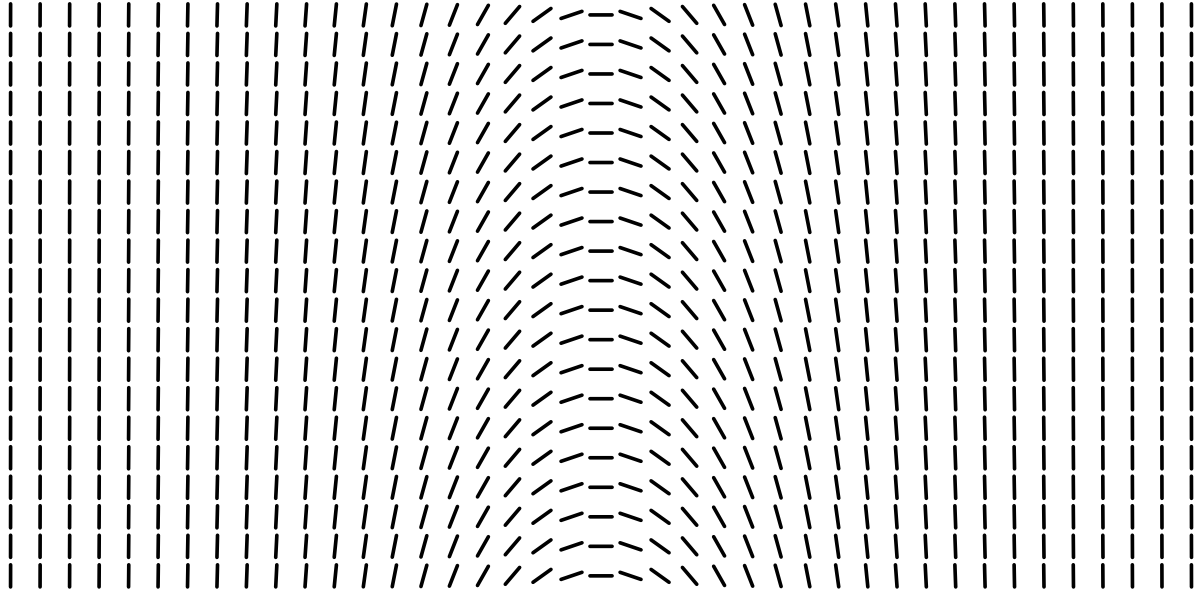


Figura 3.3: Secção de uma parede de afunilamento-flexão. O esquema representa o campo do director no plano  $xy$  da figura 2.1 de acordo com a equação 3.45.

### 3.5 NEMATODINÂMICA LINEAR

Outra simplificação interessante de (3.16) e (3.17) consiste em admitir que, para tempos curtos,  $\phi$ ,  $v$  e as suas derivadas são pequenos. Nestas condições e se, adicionalmente,

considerarmos invariância em  $z$  e  $\alpha = 0$ , obtemos

$$0 = \frac{1}{2}(\eta_b - \eta_c - \gamma_1)\phi_{,tx} + \eta_c v_{,xx} \quad (3.47)$$

$$0 = K_3\phi_{,xx} - \gamma_1\phi_{,t} - \frac{1}{2}(\eta_b - \eta_c - \gamma_1)v_{,x} + \phi\chi_a H^2 \quad (3.48)$$

A equação (3.47) permite-nos escrever

$$C^{\text{te}} = \frac{1}{2}(\eta_b - \eta_c - \gamma_1)\phi_{,t} + \eta_c v_{,x} \quad (3.49)$$

Como na ausência de gradientes de velocidade o director permanece imóvel e vice-versa, concluimos que  $C^{\text{te}}=0$ . Assim, se substituirmos  $v_{,x}$  em (3.48), obtemos

$$0 = K_3\phi_{,xx} - \eta_f\phi_{,t} + \phi\chi_a H^2 \quad (3.50)$$

em que  $\eta_f$  é a viscosidade efectiva associada à reorientação na geometria de flexão pura e tem a seguinte expressão:

$$\eta_f = \gamma_1 - \frac{(\eta_b - \eta_c - \gamma_1)^2}{2\eta_c} \quad (3.51)$$

Repare-se na semelhança entre (3.50) e (3.22). A principal diferença entre ambas as equações reside no coeficiente de  $\phi_{,t}$ . Este coeficiente é proporcional ao tempo característico da reorientação. Se admitirmos  $\phi_{,xx} = q_x^2\phi$  a equação (3.50) fornece [8, (3.20)]

$$\tau_{\text{P}} = \frac{\eta_f}{\chi_a H^2 - K_3 q_x^2} \quad (3.52)$$

Uma vez que  $\eta_f < \gamma_1$  tem-se, em geral,  $\tau_{\text{P}} < \tau_{\text{H}}$ . É de esperar que o campo do director ganhe modulações em  $x$ .

Levantando a restrição de invariância em  $z$ , é possível demonstrar [44, 59, 72] que as modulações em  $x$  só são favoráveis para valores da força magnética superiores a

$$\mathcal{M}_t^{**} = \left(1 + \frac{\eta_a \gamma_1 K_3}{\alpha_2^2 K_2}\right) \mathcal{M}_t^* \quad (3.53)$$

e se se levantar também a restrição sobre  $\alpha$ , é também possível demonstrar [9] que

$$\mathcal{M}^{**} = \frac{\mathcal{M}_t^{**}}{\mathcal{A}} \quad (3.54)$$

o valor crítico da força magnética é incrementado.

### 3.6 REFERENCIAL LOCAL

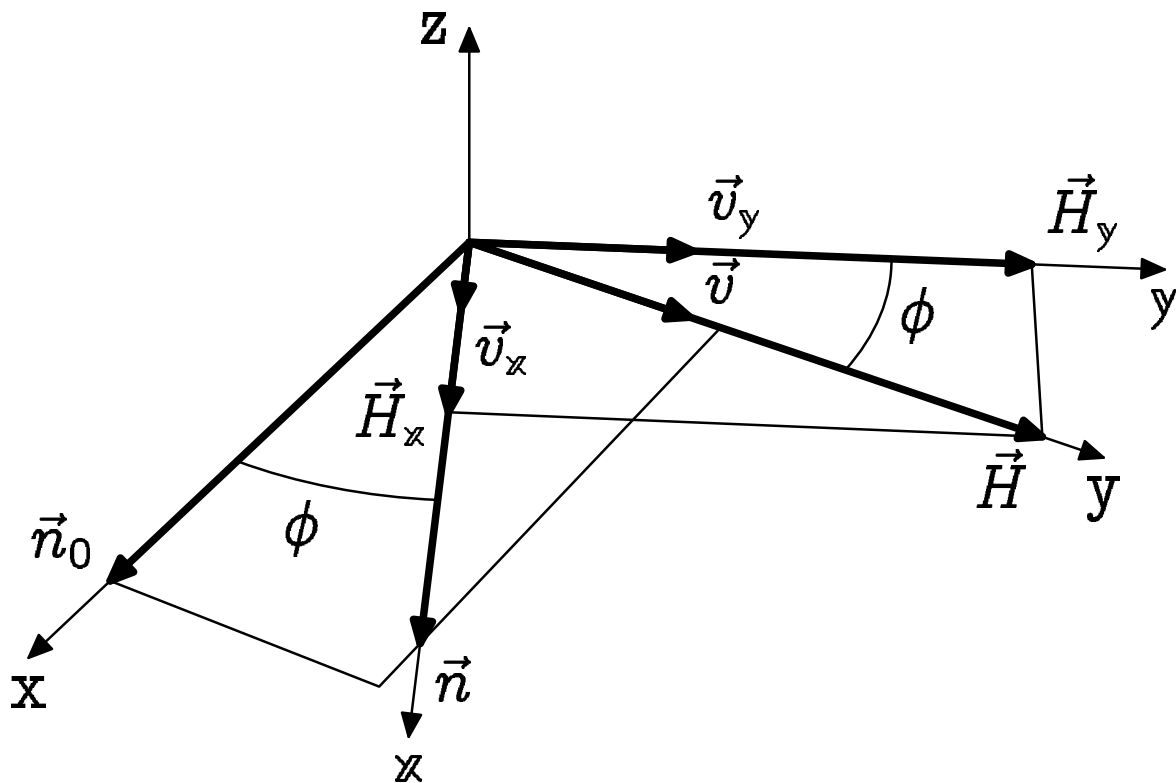


Figura 3.4: Referenciais local e global a usar na transformação das equações da nematodinâmica na geometria de torção.

A simplificação menos restritiva que é possível efectuar consiste em deduzir a equação da velocidade e a do director num referencial  $xyz$  ligado ao director (ver figura

3.4). Neste referencial temos o director

$$\left\{ \begin{array}{l} n_x = 1 \\ n_y = \delta\phi \\ n_z = 0 \end{array} \right. \quad (3.55)$$

o campo magnético

$$\left\{ \begin{array}{l} H_x = H \sin \phi \\ H_y = H \cos \phi \\ H_z = 0 \end{array} \right. \quad (3.56)$$

e a velocidade

$$\left\{ \begin{array}{l} v_x = v \sin \phi \\ v_y = v \cos \phi \\ v_z = 0 \end{array} \right. \quad (3.57)$$

As equações da nematodinâmica que se obtêm nestas condições são demasiado extensas pouco interessantes para caberem aqui, no entanto, se forem transformadas para o referencial do laboratório ganham um brilho mais apelativo. Assim, obtemos no referencial

do laboratório [81]:

$$\begin{aligned}
0 = & \left( C_\phi^2(\eta_b - \eta_c) + \frac{1}{2}(\eta_c - \eta_b - \gamma_1) \right) \phi_{,tx} \\
& + (\eta_b + C_\phi^2(\alpha_1 - C_\phi^2\alpha_1 - \eta_b + \eta_c)) v_{,xx} \\
& + (C_\phi^2\eta_a + S_\phi^2\eta_b)v_{,zz}
\end{aligned} \tag{3.58}$$

$$\begin{aligned}
0 = & K_2\phi_{,zz} \\
& - \gamma_1\phi_{,t} \\
& + (C_\phi^2K_3 + S_\phi^2K_1)\phi_{,xx} \\
& + \left( C_\phi^2(\eta_c - \eta_b) + \frac{1}{2}(\eta_b - \eta_c + \gamma_1) \right) v_{,x} \\
& + \left( \frac{1}{2}(2C_\phi^2 - 1)\sqrt{1 - \mathcal{A}^2} + S_\phi C_\phi \mathcal{A} \right) \mathcal{M}q_z^2
\end{aligned} \tag{3.59}$$

Comparando estas equações com (3.16) e (3.17) verificamos que foram eliminados os termos quadráticos nas derivadas. Estas duas últimas equações, com  $\mathcal{A} = 1$ , foram usadas por Srajer *et al.* [81] para demonstrar por simulação numérica que o valor do vector de onda  $q_x$  correspondente ao modo dominante muda, no estágio final da reorientação, para um valor inferior ao determinado por modelos lineares. Esta mudança é justificada com base no princípio de que a interacção entre modos de diferente vector de onda é desprezável quando as amplitudes são pequenas mas torna-se relevante quando já não são. Por outro lado, o estudo numérico das interacções entre modos implica a introdução das flutuações térmicas nas condições iniciais. Reproduzimos as simulações de Srajer *et al.* em §4.

## 3.7 O NOSSO MODELO

O nosso modelo constitui uma extensão dos modelos de Casquilho [9] e de Casquilho e Figueirinhas [10] já referidos, respectivamente, a propósito das equações (3.54) e (3.36). Começamos por descrever resumidamente os pressupostos destes modelos e depois descrevemos o nosso modelo.

Como se pode ver na figura 3.2, o perfil  $\phi(t, z)$  na reorientação homogénea de torção é essencialmente constante (uniforme) para tempos curtos. Apenas as poucas espessas regiões junto às fronteiras não são constantes. É por isso razoável considerar como boa aproximação para a distorção presente numa reorientação periódica genérica a composição de:

- Uma distorção uniforme; e
- Uma distorção periódica de média nula segundo o director inicial.

Isto corresponde ao *Ansatz* seguinte:

$$\begin{aligned} v_y(t, x, z) &= 0 + \xi_v(t, x, z) \\ \phi(t, x, z) &= \phi_u(t) + \xi_\phi(t, x, z) \end{aligned} \tag{3.60}$$

em que  $\xi_v$  e  $\xi_\phi$  são perturbações periódicas da reorientação uniforme. Considerando perturbações de amplitude pequena, a equação do director e a equação da velocidade podem ser linearizadas em  $\xi_v$  e  $\xi_\phi$ , fornecendo resultados analíticos para a força magnética crítica e para o vector de onda em função de  $\alpha$ .

O nosso modelo estende este último pois em vez de partir de uma distorção uniforme parte de uma distorção homogénea, a qual é composta com uma perturbação periódica oblíqua no plano da amostra. No entanto, não nos permite obter resultados analíticos, apenas numéricos. É utilizado o *Ansatz*:

$$\begin{aligned} v_x(t, x, y, z) &= -v_a(t)q_y \sin(q_x x + q_y y) \cos(q_z z) \\ v_y(t, x, y, z) &= v_a(t)q_x \sin(q_x x + q_y y) \cos(q_z z) \\ \phi(t, x, y, z) &= (\phi_H(t) + \phi_P(t) \cos(q_x x + q_y y)) \cos(q_z z) \end{aligned} \tag{3.61}$$

Este *Ansatz* respeita o constrangimento de incompressibilidade (1.27).  $\phi(t, x, y, z)$  é composto pela soma de um termo correspondente à reorientação homogénea  $\phi_H(t) \cos(q_z z)$  e de um termo correspondente à perturbação periódica do campo do director  $\phi_P(t) \cos(q_x x + q_y y) \cos(q_z z)$ . A velocidade está associada à existência da perturbação periódica do campo do director ( $q = 0 \Rightarrow v = 0$ ). O nosso modelo consiste na resolução das equações

da nematodinâmica em  $(x, y, z) = (0, 0, 0)$ , com este *Ansatz*, mas separando a determinação de  $\phi_{\text{H}}(t)$  da determinação de  $\phi_{\text{P}}(t)$  e  $v_a(t)$ . O vector de onda seleccionado a cada instante  $t$  é obtido por maximização de  $\phi_{\text{P}}(t)$ .

#### CONDIÇÃO INICIAL

Considera-se o campo magnético inicialmente alinhado com o director. O campo do director contém distorções de pequena amplitude que reproduzem as flutuações térmicas.

#### DETERMINAÇÃO DE $\phi_{\text{H}}(t)$

A equação completa do director é utilizada para determinar  $\phi_{\text{H}}(t)$ , através do método de Runge-Kutta de quarta ordem, desde o instante  $t = 0$  em que  $\vec{n} \parallel \vec{H}$ , passando pelo instante  $t = T$ , em que o ângulo entre  $\vec{n}_0$  e  $\vec{H}$  atinge o valor  $\frac{\pi}{2} + \alpha$ , e até um instante  $t \gg T$ .

#### DETERMINAÇÃO DE $\phi_{\text{P}}(t)$ , $v_a(t)$ E $\vec{q}(t)$

Uma vez tendo sido determinada  $\phi_{\text{H}}(t)$  durante a rotação e evolução posterior, as equações da nematodinâmica linearizadas em  $\phi_{\text{P}}(t)$  e  $v_a(t)$  constituem um sistema de duas equações diferenciais ordinárias de primeira ordem que são resolvidas pelo método de Runge-Kutta de quarta ordem. Para cada instante  $t$ ,  $\phi_{\text{P}}(t)$  e  $v_a(t)$  são integrados desde  $t = 0$  até  $t = t$  para um dado valor de  $q_x$  e  $q_y$ , utilizando na integração o valor de  $\phi_{\text{H}}(t)$  determinado anteriormente. Por variação de  $q_x$  e  $q_y$  é encontrado o máximo de  $\phi_{\text{P}}(t)$ , ficando assim definidos  $\phi_{\text{P}}(t)$ ,  $v_a(t)$ ,  $q_x(t)$  e  $q_y(t)$ . O cálculo é repetido para os outros instantes.

Este modelo tem uma gama de aplicabilidade restringida à situação em que  $\phi_{\text{P}}(t)$  pode ser considerado uma pequena perturbação a  $\phi(t)$ . Veremos os resultados das simulações com este e outro modelo em §4. Entretanto aqui fica o respectivo sistema de equações diferenciais:

$$\begin{bmatrix} A & -\rho q_x^2 - \rho q_y^2 \\ \alpha_3 - \alpha_2 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \frac{d\phi_{\text{P}}}{dt} \\ \frac{dv_a}{dt} \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} B & C \\ D & -A \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \phi_{\text{P}} \\ v_a \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix} \quad (3.62)$$



em que

$$A \equiv \alpha_3 q_x^2 - \alpha_2 q_y^2 + (\alpha_2 + \alpha_3)(q_y^2 - q_x^2)C_\phi^2 - 2(\alpha_3 + \alpha_2)q_x q_y C_\phi S_\phi \quad (3.63)$$

$$B \equiv 2(\alpha_2 + \alpha_3)(q_y q_x (1 - 2C_\phi^2) + (q_x^2 - q_y^2)C_\phi S_\phi) \frac{d\phi}{dt} \quad (3.64)$$

$$C \equiv \frac{1}{2}(-2\alpha_1 + \alpha_2 + \alpha_3 - \alpha_5 + \alpha_6)(q_x^4 + q_y^4)C_\phi^2 + 6\alpha_1 q_y^2 q_x^2 C_\phi^2 + \frac{1}{2}(\alpha_3 + \alpha_6)(q_x^2 - q_y^2)q_z^2 C_\phi^2 + 4\alpha_1(q_x^3 - q_y^3)q_y C_\phi^3 S_\phi + 2\alpha_1(q_x q_y^3 - q_x^3 q_y)C_\phi S_\phi + (\alpha_2 + \alpha_3 - \alpha_5 + \alpha_6)(q_x^3 q_y + q_x q_y^3)C_\phi S_\phi \quad (3.65)$$

$$+ (\alpha_3 + \alpha_6)q_x q_y q_z^2 C_\phi S_\phi + \alpha_1(q_x^4 + q_y^4 - 6q_y^2 q_x^2)C_\phi^4 - \frac{1}{2}(\alpha_3 + \alpha_4 + \alpha_6)(q_x^4 + q_x^2 q_z^2 - q_y^2) - \frac{1}{2}\alpha_4 q_y^2 q_z^2 + \frac{1}{2}(-2\alpha_1 + \alpha_2 - \alpha_3 - 2\alpha_4 - \alpha_5 - \alpha_6)q_y^2 q_x^2$$

$$D \equiv K_1 q_x^2 + K_2 q_z^2 + K_3 q_y^2 + h_0^2 ((1 - 2C_\beta^2)(1 - 2C_\phi^2) + 4C_\beta S_\beta C_\phi S_\phi) + (K_1 - K_3)(q_y^2 - q_x^2)C_\phi^2 - 2(K_1 - K_3)q_x q_y C_\phi S_\phi \quad (3.66)$$

O ângulo  $\phi$  que aparece nestas equações é  $\phi_{\text{H}} \cos(q_z z)$  que é determinado pela equação da reorientação homogênea. A intensidade do campo magnético é introduzida como  $h_0 = \sqrt{\chi_a} H$ . O ângulo  $\beta$  é medido entre o director de fronteira e o campo magnético. O eixo dos  $xx$  é paralelo ao director de fronteira.

# CAPÍTULO 4

## MEDIDAS

*Vox faucibus hæsit*

### 4.1 MONTAGEM EXPERIMENTAL

A figura 4.1 mostra esquematicamente a arquitectura da montagem experimental. São utilizadas células planares fabricadas por E . H . C . C O . Estas células possuem forma rectangular de dimensões  $12 \times 25 \text{ mm}^2$  com dois vidros de 0,7 mm de espessura e  $50 \mu\text{m}$  de espaçamento. O ângulo de ancoragem azimutal é de  $1^\circ$  relativamente à direcção das mais longas arestas das células\*. As células são preenchidas com uma das duas seguintes substâncias: 5CB e 7CB (ver tabelas 4.1 e 4.2, e figura 4.2). As amostras

Tabela 4.1: Substâncias utilizadas nas experiências. O 7CB pode ter a sua fase nemática sobrearrefecida até  $15^\circ\text{C}$ .

Abreviatura	5CB	7CB
Nome	4-n-pentil-4'-cianobifenil	4-n-heptil-4'-cianobifenil
Transições	Cr $24^\circ\text{C}$ N $36^\circ\text{C}$ I	Cr' $15^\circ\text{C}$ Cr $30^\circ\text{C}$ N $43^\circ\text{C}$ I

---

\*Dados do fabricante.

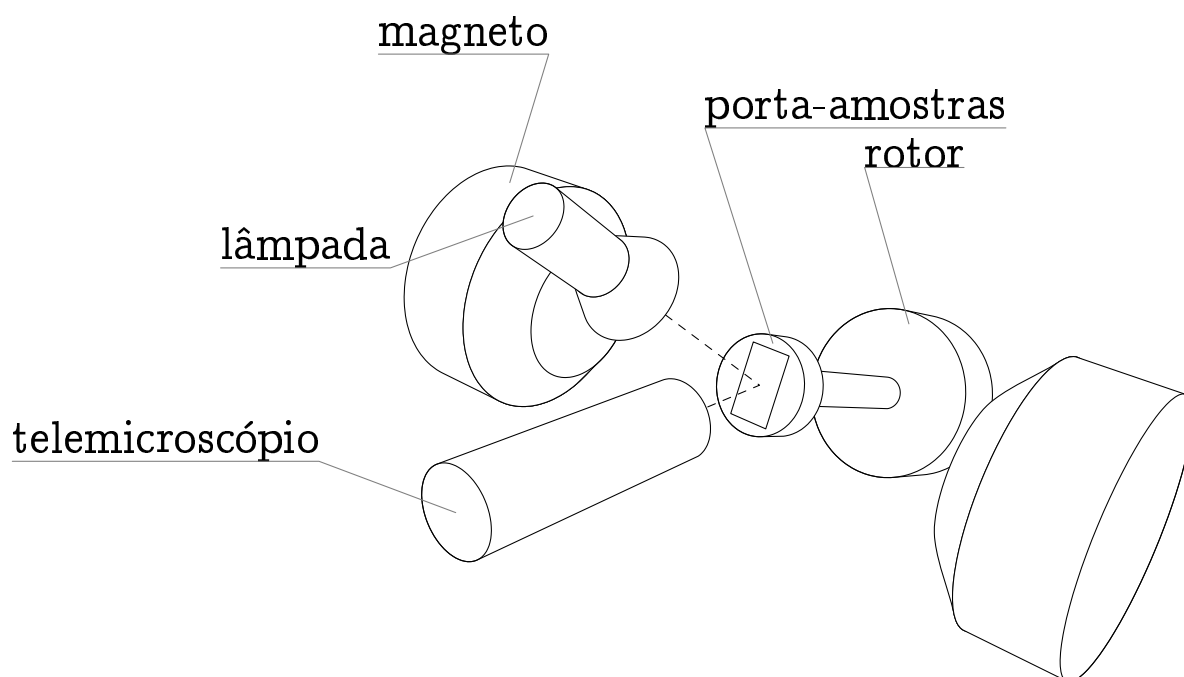


Figura 4.1: Representação esquemática da montagem experimental. O tamanho do entreferro do electromagneto é apenas 1 mm superior à diagonal das amostras. O ângulo entre os eixos da lâmpada e do telemicroscópio é de cerca de  $20^\circ$ . Tanto o rotor como a câmara de vídeo acoplada ao telemicroscópio se encontram fora da influência do campo magnético. A lâmpada fornece luz branca polarizada verticalmente. O efeito de Faraday é desprezável.

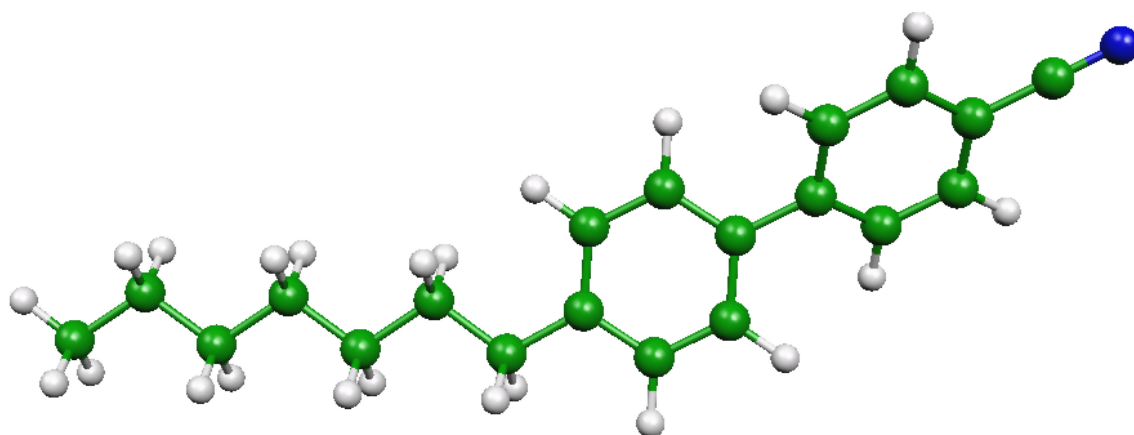


Figura 4.2: Estrutura molecular do 7CB. O 5CB possui uma cadeia alifática com menos dois átomos de carbono e menos quatro átomos de hidrogênio.

são células que passaram pelo seguinte processo:

1. Selagem dos dois lados mais longos com resina epoxídica. Esta selagem é efectuada estando a célula deitada sobre uma folha de papel branco. O papel fica colado à célula. Esta operação tem dois objectivos:
  - Associar à célula uma superfície reflectora e difusora de luz.
  - Facilitar a selagem final tornando-a menos extensa.
2. Preenchimento da célula. São necessários cerca de  $9\mu\text{l}$  da substância líquida-cristalina.
3. Selagem dos dois lados mais curtos com resina curável por ultra-violetas MEDICAL ENGINEERING TECHNOLOGIES FLEXIBOND 782 . A parte central da célula é embrulhada em papel de alumínio durante os cinco minutos de exposição aos ultra-violetas.

O campo magnético é produzido por um electromagneto VARIAN V - 7400 que é arrefecido por um permutador de calor V - 7873 e regulado por uma fonte de alimentação VARIAN FIELDIAL MARK I . A intensidade campo magnético

Tabela 4.2: Parâmetros materiais do 5CB a  $26^\circ\text{C}$  [1].

$K_1$	$5,95 \times 10^{-7}$ dyne	$\chi_a$	$1,144 \times 10^{-7}$
$K_2$	$3,77 \times 10^{-7}$ dyne	$\alpha_1$	-0,066 poise
$K_3$	$7,86 \times 10^{-7}$ dyne	$\alpha_2$	-0,77 poise
$\eta_a$	1,014 poise	$\alpha_3$	-0,042 poise
$\eta_b$	0,204 poise	$\alpha_4$	0,634 poise
$\eta_c$	0,317 poise	$\alpha_5$	0,624 poise
$\gamma_1$	0,728 poise	$\alpha_6$	-0,184 poise

pode atingir 2 T. A amostra é iluminada com uma lâmpada de halogéneo com uma potência de 55 W e que, por sua vez, é alimentada por um divisor de tensão baseado num reóstato de  $11 \Omega$  e num transformador capaz de fornecer uma corrente de 5 A. A luz é polarizada linearmente no plano de incidência. O ângulo de incidência é igual ao ângulo de observação (cerca de  $10^\circ$ ). A câmara de video colorido JVC TK-1281EG, a placa de aquisição de imagem GENIUS VIDEO WONDER PRO IIV2 e o computador PENTIUM II a 400 MHz com 90 Mbyte de memória RAM permitem a captura de filmes a uma taxa mantida de 30,72 Mbit/s. As amostras são fixadas a um porta-amostras em bronze por intermédio de quatro parafusos protegidos com anilhas de borracha. O porta-amostras é enroscado num veio maciço de NYLON reforçado com fibra de vidro ligado a um rotor mecânico. Este rotor permite rodar a amostra no interior do campo magnético em tempos da ordem de 30 ms e permite regular a amplitude da rotação em escalões de, pelo menos,  $0,16^\circ$ . A chumaceira que apoia o porta-amostras é aquecida por duas resistências de aquecimento ANTEX XS25. As resistências são alimentadas por um controlador OMEGA CN-2011 que mede a temperatura através de uma resistência de platina também inserida na chumaceira. A temperatura na amostra é inferior à temperatura na chumaceira e a diferença é inferior a  $2^\circ\text{C}$ .

Esta montagem foi desenvolvida para obter dados relativos à dinâmica de reorientação magnética do campo do director na geometria de torção. Isto implica submeter um monodomínio nemático uniformemente orientado a um campo magnético aproximadamente perpendicular. São de dois tipos as implementações que permitem cumprir esta condição:

- É imposta uma rápida subida da intensidade da corrente eléctrica no electromagneto desde zero até um valor não-nulo e posteriormente constante. Este tipo de implementação tem a vantagem de não perturbar o campo do director mas necessita de um sofisticado sistema de comutação. Dado que não dispomos deste sistema usamos este método com subida lenta do campo apenas para efectuar o

alinhamento inicial da amostra.

- Muda-se subitamente a orientação da amostra no interior do campo magnético. Este tipo de implementação tem baixa complexidade e foi, por isso, escolhido.

## 4.2 PROCEDIMENTO EXPERIMENTAL

1. Alinhar a amostra de forma a que as arestas mais longas fiquem perpendiculares ao campo magnético. Esta operação é levada a cabo procurando a orientação que, ao ligar o electromagneto, leva à formação de estruturas periódicas com intensidade mínima do campo magnético [13, 20]. Como a intensidade do campo magnético é baixa o tempo de formação das estruturas periódicas que indicam o alinhamento correcto é suficientemente longo para descartar sistemas sofisticados de comutação.
2. Acertar a orientação de arranque e de fim da rotação súbita da amostra com base no alinhamento de referência obtido anteriormente. O ângulo total de rotação tem uma incerteza sistemática de  $1^\circ$ .
3. Regular a temperatura da amostra.
4. Preparar o permutador de calor e a fonte de alimentação do electromagneto.
5. Preparar o sistema óptico. Regular o posicionamento do telemicroscópio, da lâmpada e do polarizador. Regular a focagem.
6. Preparar o sistema de aquisição de imagens. É necessário seleccionar a resolução e a profundidade de cada imagem, a taxa de aquisição (*frame-rate*), o contraste, o brilho, a saturação, a velocidade de obturação e o nome do ficheiro em que se vai armazenar a sequência de imagens (filme).
7. Regular a intensidade da corrente eléctrica no electromagneto. Iniciar a captura do filme. Efectuar a rotação súbita da amostra. Observar a formação de estruturas periódicas. Terminar a captura do filme. Desligar a corrente. Esperar algum tempo até que o nemático recupere a uniformidade (cerca de meio minuto). Recolocar a amostra na orientação de arranque.

8. Repetir para vários valores da intensidade da corrente e para várias orientações de fim da rotação súbita. A orientação de fim da rotação é alterada em passos múltiplos de  $0,24^\circ$ .
9. Repetir com outra amostra.

Sabendo que as estruturas periódicas observadas são listas paralelas, ou seja, constituem um padrão unidimensional, ficamos em condições de identificar e definir algumas das grandezas relevantes para estas experiências (ver figura 4.3).

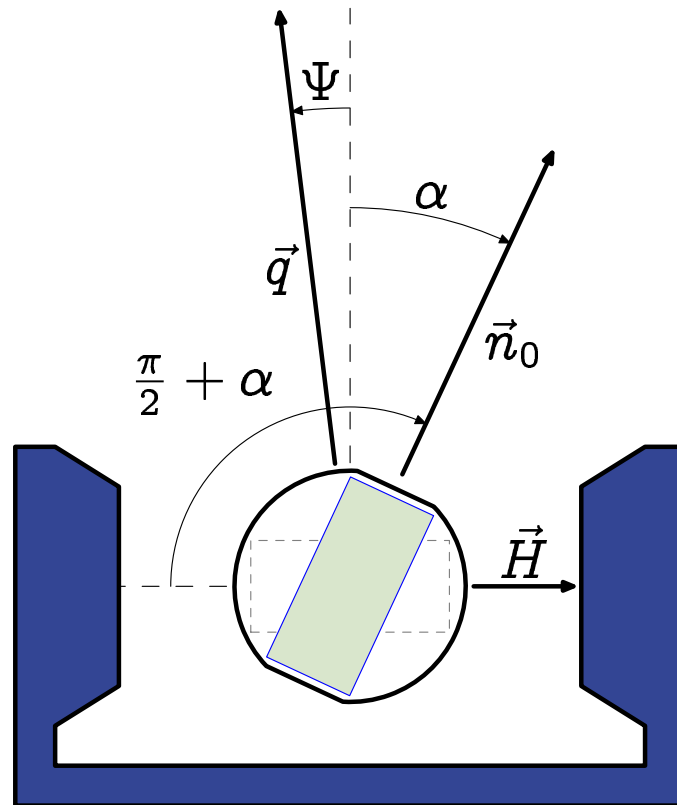


Figura 4.3: Esquema para a identificação das grandezas relevantes nas experiências. O ângulo total de rotação súbita da amostra no campo magnético é  $\frac{\pi}{2} + \alpha$ . O padrão periódico é caracterizado por um vetor de onda  $\vec{q}$  que tem uma inclinação  $\Psi$  relativamente à vertical. O campo magnético tem uma intensidade  $H$ .

## 4.3 OBSERVAÇÕES PRELIMINARES

A observação da reorientação magnética na nossa montagem experimental revela essencialmente três tipos de estruturas periódicas unidimensionais:

### BANDAS

Apresentam baixo contraste, possuem duração limitada no tempo e podem ser ou horizontais ou inclinadas (ver figura 4.4 e §A.2).

### PAREDES ESTÁVEIS

Apresentam alto contraste, possuem duração prolongada e são horizontais (ver figura 4.5).

### PAREDES INSTÁVEIS

Apresentam alto contraste, possuem duração reduzida e são inclinadas, em geral, no sentido contrário ao da rotação súbita da amostra (ver figura 4.6).

Dada esta classificação, podemos desenhar mapas de tipos de estruturas periódicas no espaço dos parâmetros  $\{H, \alpha\}$ . O primeiro destes mapas que obtivemos encontra-se na figura 4.7. Neste, usámos a amostra de 7CB a 28 °C. Pode verificar-se na tabela 4.1 que esta temperatura é inferior à da transição N–Cr. No entanto, o 7CB pode ser sobre-arrefecido no estado nemático até esta temperatura. Neste caso, como a viscosidade é acrescida, o processo de formação e desaparecimento das estruturas periódicas torna-se suficientemente lento para poder ser acompanhado visualmente. Ainda assim, não é muito clara a distinção entre os dois tipos de paredes. Veremos mais à frente como quantificar e caracterizar os diferentes tipos de estruturas periódicas. Agora podemos referir dois dos aspectos que se virão a confirmar e que se encontram já nos resultados representados na figura 4.7:

- Não há simetria entre os resultados com  $\alpha < 0$  e os com  $\alpha > 0$ . Existe um efeito da rotação súbita da amostra que é feita no sentido dos ponteiros do relógio.
- O valor mínimo de  $H$  para o qual se detectam bandas ocorre para  $-0,5^\circ < \alpha < 0$ . Isto pode ser devido à incerteza do ângulo total de rotação que é de  $1^\circ$ .



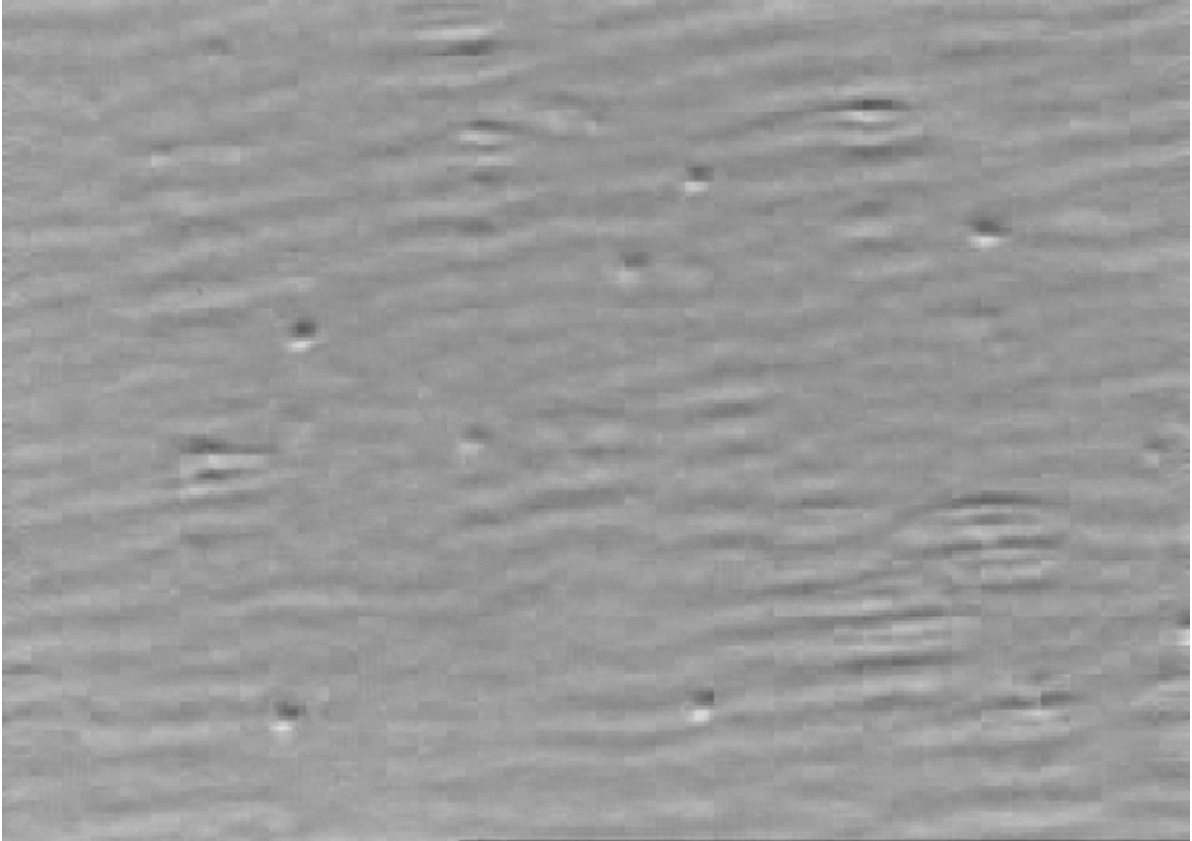


Figura 4.4: Fotograma exemplificativo do que designamos por “bandas” (código 7CBm04075S17). Os fotogramas mostram uma área da amostra com as dimensões aproximadas  $2,4 \times 1,8 \text{ mm}^2$ . O lado mais longo do fotograma é paralelo ao campo magnético.

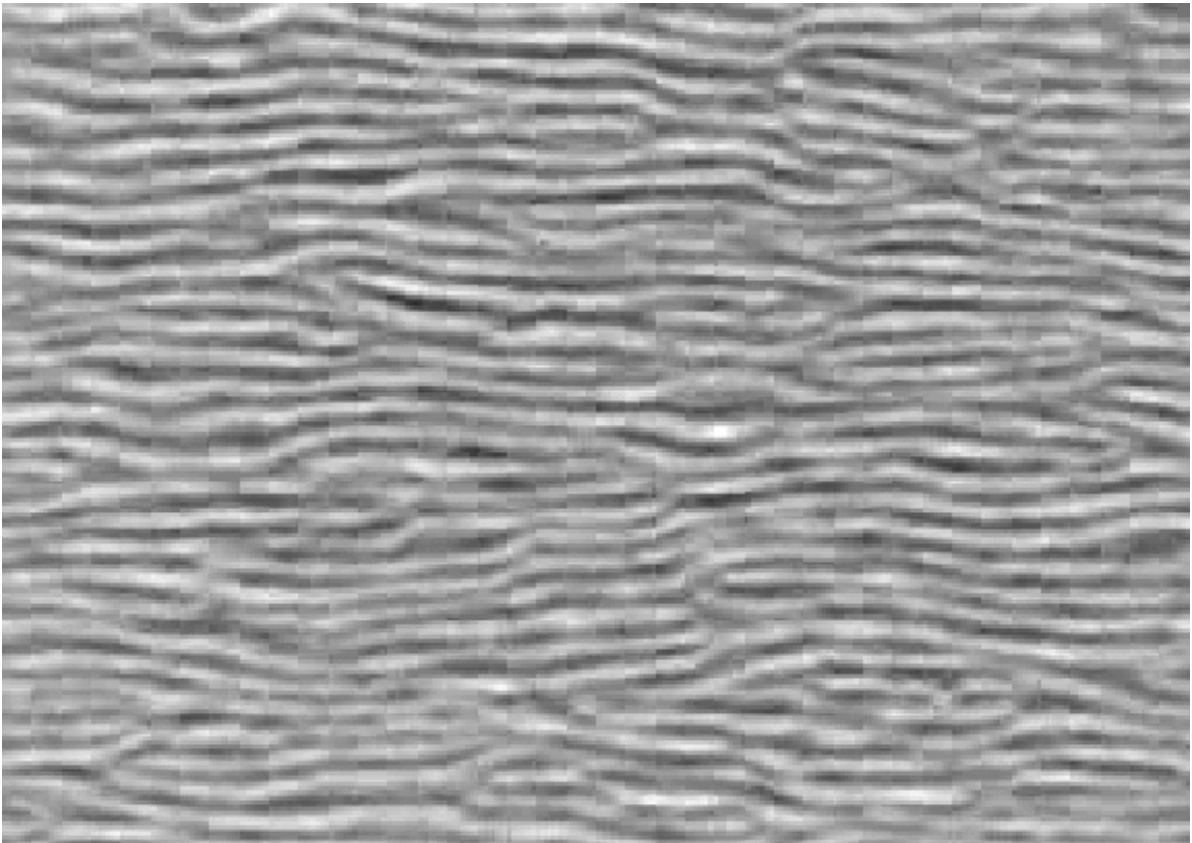


Figura 4.5: Fotograma exemplificativo do que designamos por “paredes estáveis” (código 7CBp00065T35).

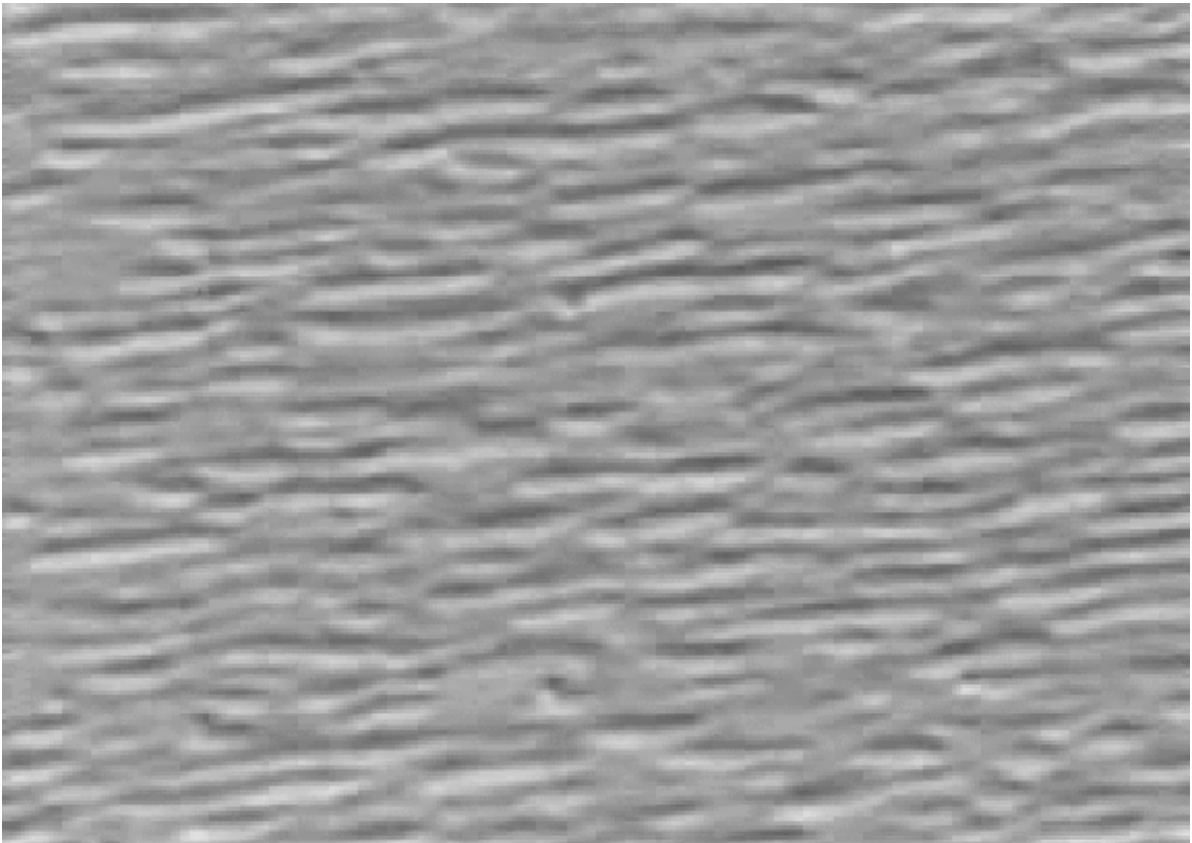


Figura 4.6: Fotograma exemplificativo do que designamos por “paredes instáveis” (código 7CBp00155L16).

O segundo dos mapas encontra-se na figura 4.8. Neste, usámos a amostra de 5CB a 26°C. A principal diferença face ao mapa 4.7 consiste em terem sido detectadas estruturas periódicas numa menor gama de  $\alpha$ .

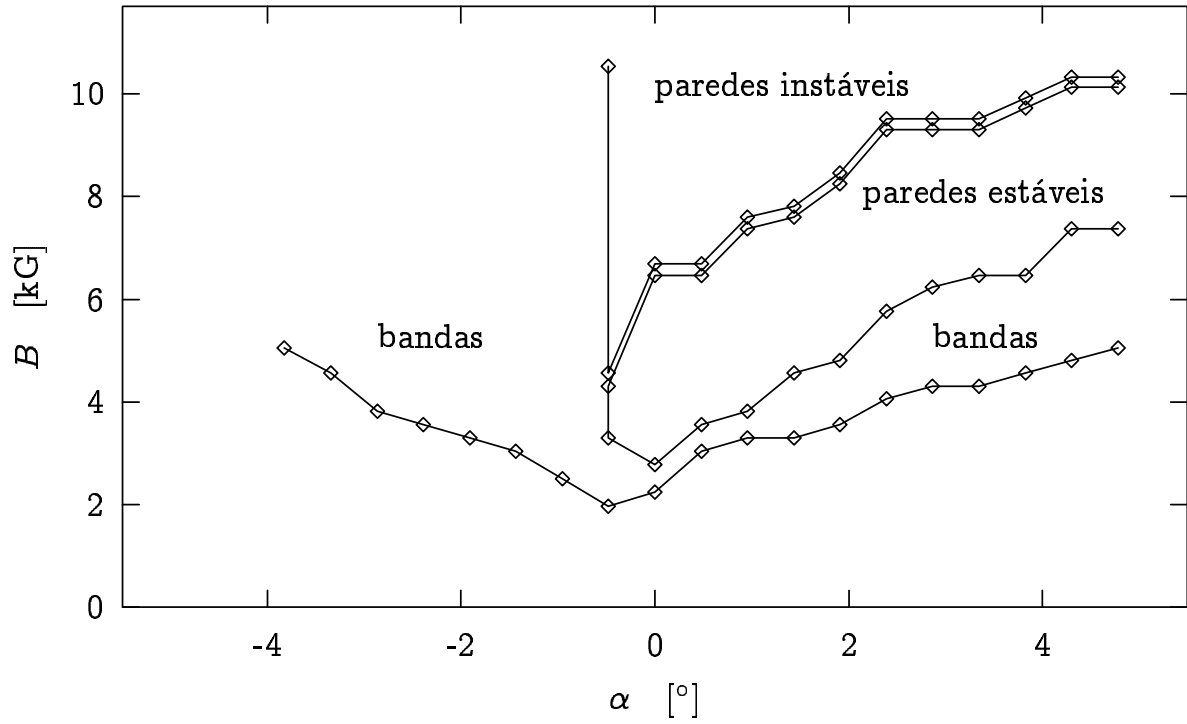


Figura 4.7: Mapa de tipos de estruturas periódicas do 7CB a 28°C. Estes dados foram obtidos por observação directa das imagens capturadas durante a reorientação magnética numa malha rectangular de pares  $(H, \alpha)$ .

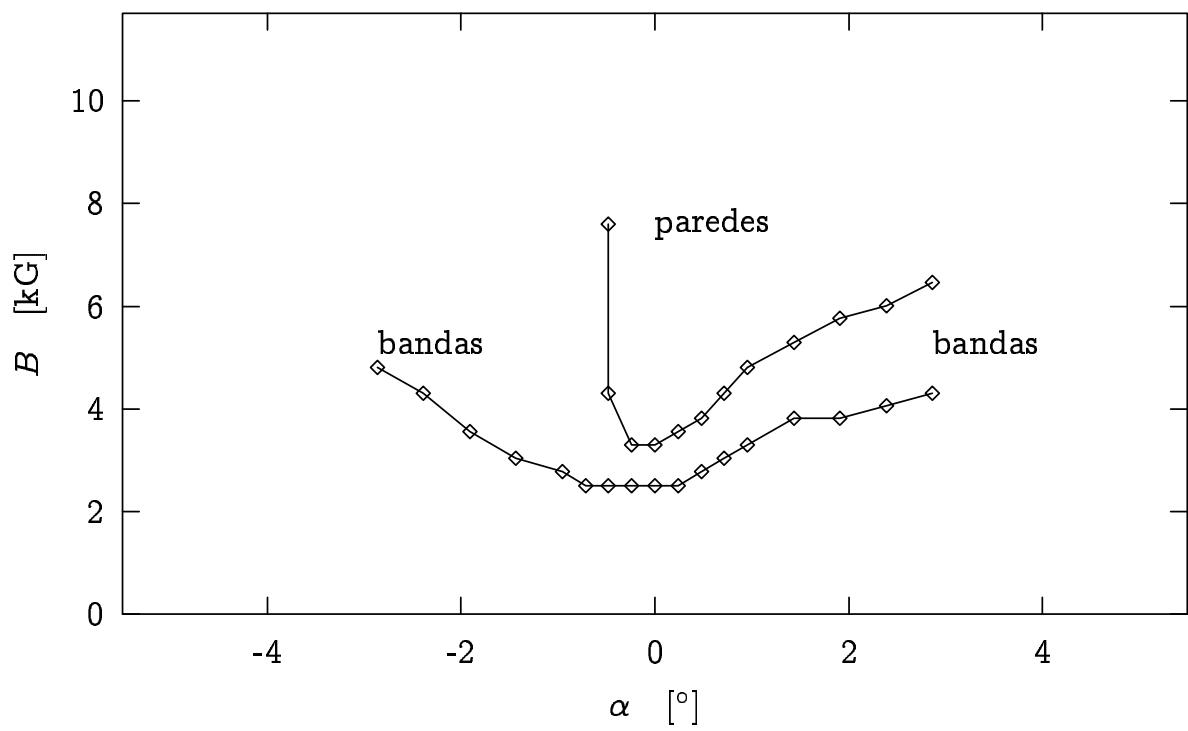


Figura 4.8: Mapa de tipos de estruturas periódicas do 5CB a 26°C. Não foi possível distinguir entre paredes estáveis e instáveis.

## 4.4 RESULTADOS

Sendo o nosso objectivo a obtenção de resultados quantitativos relativos ao vector de onda  $\vec{q}$  das estruturas periódicas obtiveram-se transformadas de Fourier bidimensionais das imagens. No sentido de diminuir a incerteza nos resultados, optou-se por determinar separadamente, para cada fotograma:

- O espectro de potência unidimensional  $A_{\max}(q_{\perp})$  em que  $q_{\perp}$  é a componente do vector de onda na direcção vertical, perpendicular ao campo magnético, paralela ao plano da amostra e  $A_{\max}$  é a amplitude espectral máxima em  $q_{\parallel}$ . Isto corresponde a colapsar o espectro de potência bidimensional sobre um eixo vertical (lado mais curto dos fotogramas).
- O ângulo  $\Psi$  de inclinação das estruturas periódicas através de uma transformada de Hough [39, 48].

Acerca das transformadas de Hough e de como foram aplicadas às nossas imagens ver §D.

### 4.4.1 PROCEDIMENTO EXPERIMENTAL NÃO-LABORATORIAL

Cada um dos filmes obtidos é sujeito à seguinte sequência de tratamentos computacionais:

1. Conversão de formato `avi` para formato `mpeg1`.
2. Obter de cada fotograma de cada filme:
  - O desvio padrão dos níveis de cinzento do canal vermelho.
  - A curva  $A_{\max}(q_{\perp})$ .
  - O ângulo  $\Psi$ .
  - A incerteza de  $\Psi$ .
3. Extrair de cada filme:

- O número de ordem do fotograma correspondente ao instante da rotação súbita. Neste instante o desvio padrão dos níveis de cinzento é mínimo.
- O ângulo  $\Psi$  de menor incerteza e respectiva incerteza.
- Os vectores de onda e respectivas incertezas, os tempos desde a rotação súbita e as amplitudes correspondentes aos máximos da superfície  $A_{\max}(q_{\perp}, t)$ .

Os resultados experimentais apresentados seguidamente referem-se apenas ao 5CB a 26 °C.

Quanto à incerteza dos valores da intensidade do campo magnético ver §C.

#### 4.4.2 RESULTADOS RELATIVOS AO VECTOR DE ONDA E AO TEMPO

A mais pesada das computações efectuadas foi a conversão de cada sequência de imagens, ou seja, de cada filme, numa superfície  $A(q, t)$ . São apresentadas a seguir várias destas superfícies na forma de linhas de contorno a diversos valores da amplitude espectral. Por exemplo, na figura 4.9 são visíveis os dois modos dominantes:

##### MODO LINEAR

Corresponde às bandas. Tem duração limitada.

##### MODO NÃO-LINEAR

Corresponde ao estágio final das bandas e às paredes. Não varia apreciavelmente nem com  $B$  nem com  $\alpha$ .

Poderão estar presentes outros modos de amplitude desprezável e outros de amplitude análoga mas sómente a tempos longos. Os nomes “linear” e “não-linear” resultam da interpretação de Srajer *et al.* [81], já referida na página 79, e que indica: (i) o vector de onda seleccionado no início da reorientação corresponde ao determinado pelos modelos lineares e (ii) no fim da reorientação um modo de vector de onda inferior torna-se dominante. Este último modo é previsto por modelos não-lineares. Uma vez identificados os modos podemos verificar de que maneira dependem de  $B$  e  $\alpha$ . Na figura 4.13 apresentamos a variação do vector de onda  $q_{\perp}$  no instante de máxima amplitude

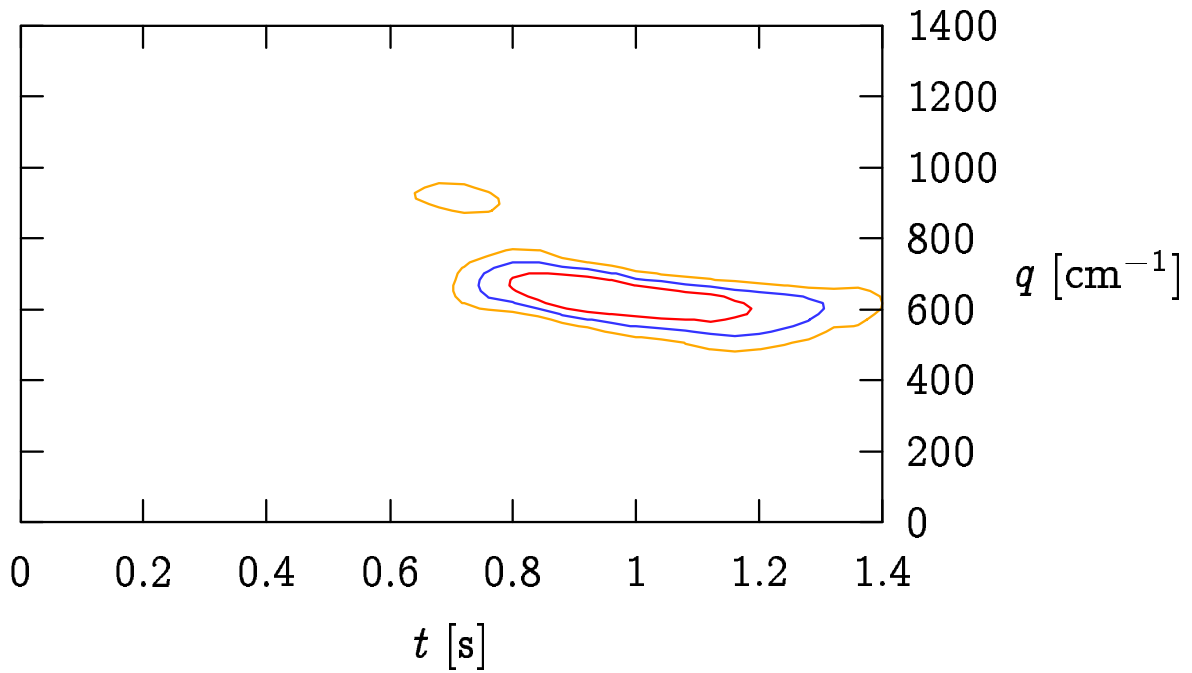


Figura 4.9: Linhas de contorno da superfície  $A(q, t)$  do filme 5CBm03110A obtido a 5,77 kG e  $\alpha = -0,72^\circ$ . São visíveis, por ordem decrescente de vector de onda e por ordem crescente de tempo, os máximos de amplitude dos modos linear e não-linear.

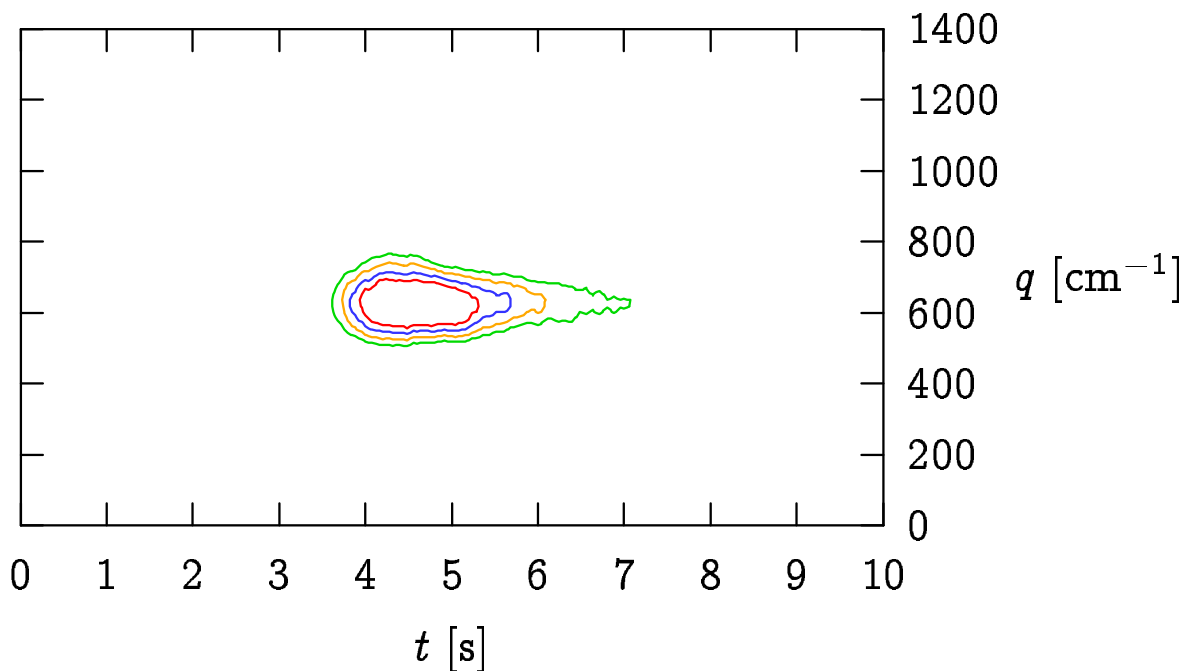


Figura 4.10: Linhas de contorno da superfície  $A(q, t)$  do filme 5CBm01065A obtido a 3,55 kG e  $\alpha = -0,24^\circ$ . Observa-se a amplitude do modo linear a aumentar e depois a diminuir mais lentamente.



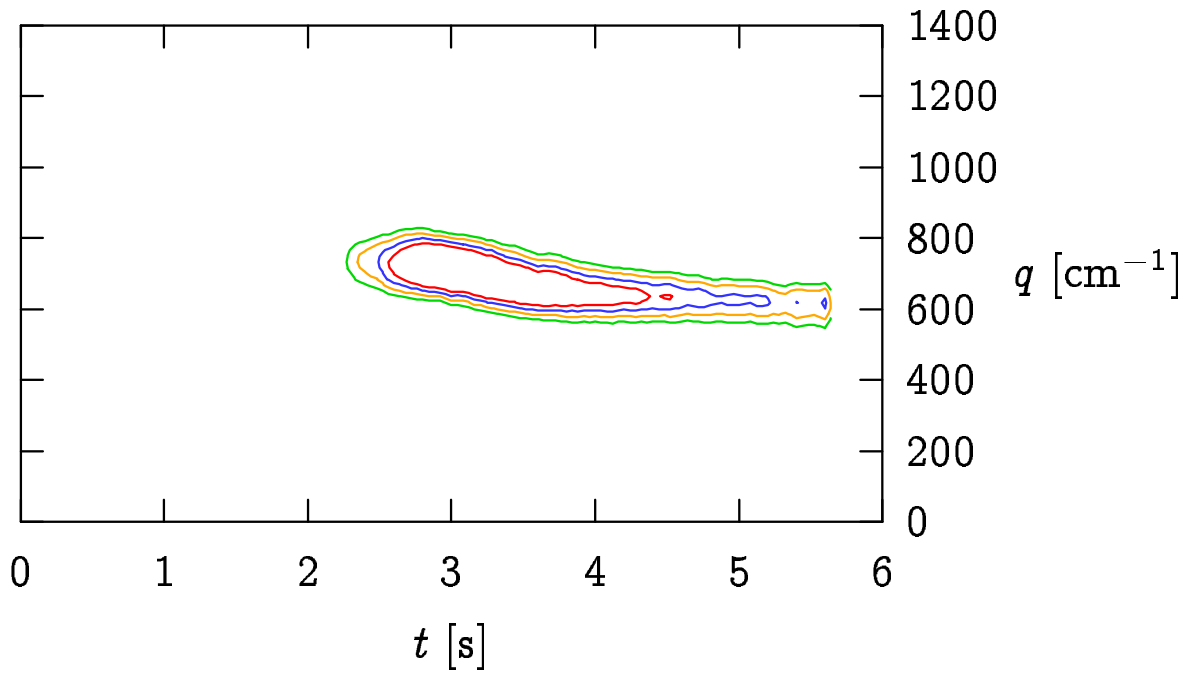


Figura 4.11: Linhas de contorno da superfície  $A(q, t)$  do filme 5CBp00075A obtido a 4,06 kG e  $\alpha = 0$ . Observa-se um ligeiro decaimento do vector de onda correspondente ao modo linear.

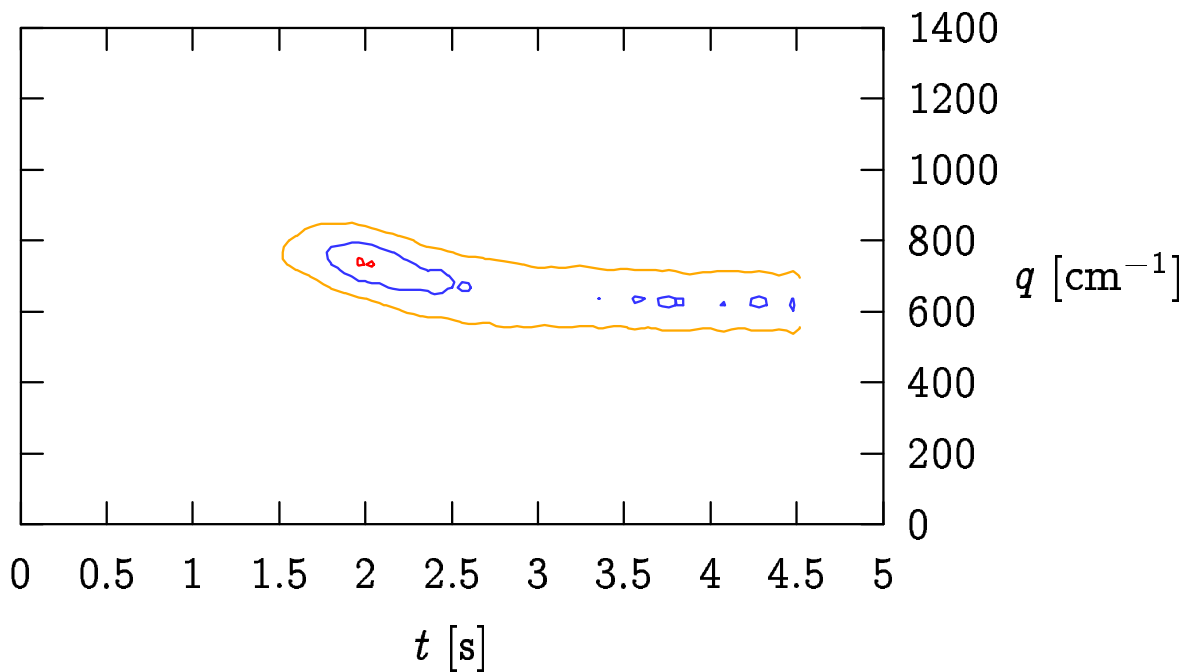


Figura 4.12: Linhas de contorno da superfície  $A(q, t)$  do filme 5CBp02085A obtido a 4,56 kG e  $\alpha = 0,48^\circ$ .

da perturbação periódica em função do campo magnético para  $|\alpha| < 1^\circ$ . Para valores de  $|\alpha| > 1^\circ$  a dispersão dos resultados aumenta significativamente devido ao baixo contraste das imagens provocado pela pequena amplitude da perturbação periódica. Por isso limitaremos a nossa análise ao intervalo  $|\alpha| < 1^\circ$ . Podemos verificar na figura 4.13 e na figura 4.14 que: (i) os valores experimentais do vector de onda correspondente ao modo linear crescem com o campo magnético e possuem uma dispersão da mesma ordem de grandeza que a incerteza de leitura (determinada a partir da largura a meia altura dos picos espectrais); (ii) os valores experimentais do tempo necessário para atingir a amplitude máxima do modo linear diminuem com o campo magnético e possuem uma dispersão da mesma ordem de grandeza que a incerteza de leitura (determinada a partir das durações das “ilhas” nos gráficos das linhas de contorno de  $A(q, t)$ ); e (iii) não é possível identificar nenhum tipo de dependência nem do vector de onda nem dos tempos no ângulo  $\alpha$  na gama de valores de  $\alpha$  apresentados.

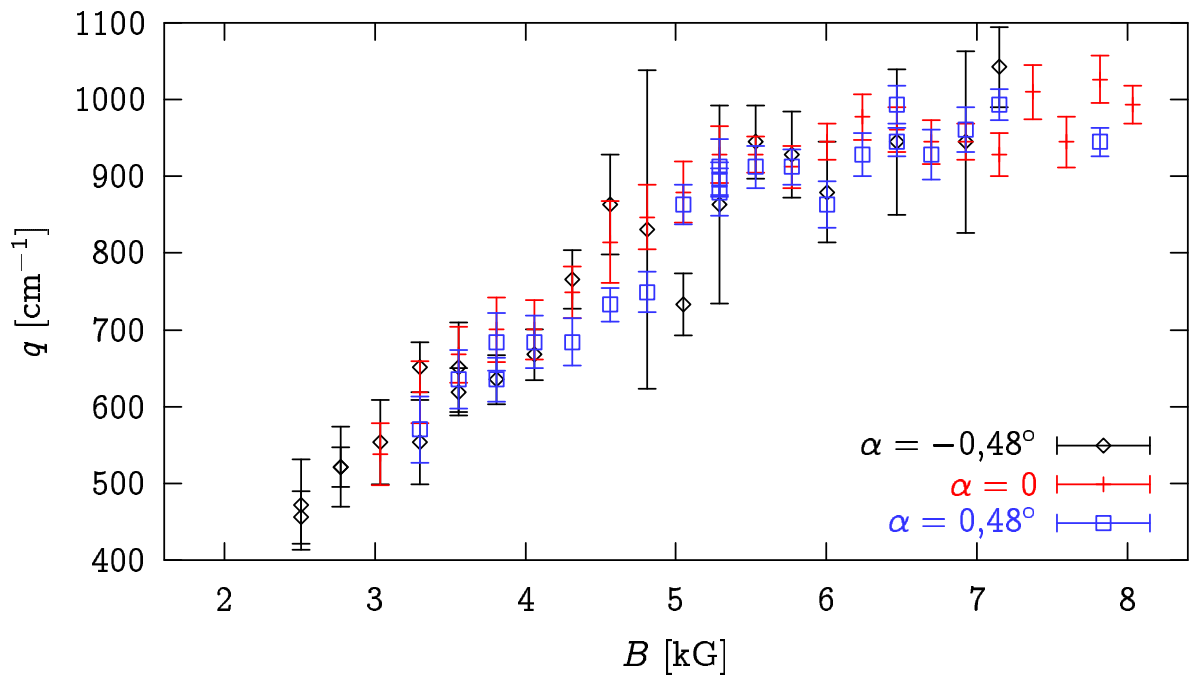


Figura 4.13: Dados experimentais relativos ao vector de onda do modo linear para valores de  $\alpha$  próximo de zero.

### 4.4.3 RESULTADOS RELATIVOS À INCLINAÇÃO DAS BANDAS

Mostrou-se possível obter resultados relativos à inclinação das bandas numa gama de valores de  $\alpha$  superior a  $[-1^\circ; +1^\circ]$ . A figura 4.15 mostra as linhas de contorno da superfície  $\Psi(\alpha, B)$  experimental. No sentido de obter uma aproximação analítica entre  $\alpha$  e  $B$  para a qual  $\Psi(\alpha, B) = 0$  (ou seja,  $\vec{q} \perp \vec{H}$ ), a função

$$\sum_{i=0}^3 \sum_{j=0}^i a_{ij} \alpha^i B^j$$

foi ajustada à superfície  $\Psi(\alpha, B)$  experimental através dos parâmetros  $a_{ij}$  pelo método dos mínimos desvios quadrados ponderados pelas incertezas  $\Delta\Psi(\alpha, B)$  (ver §D).

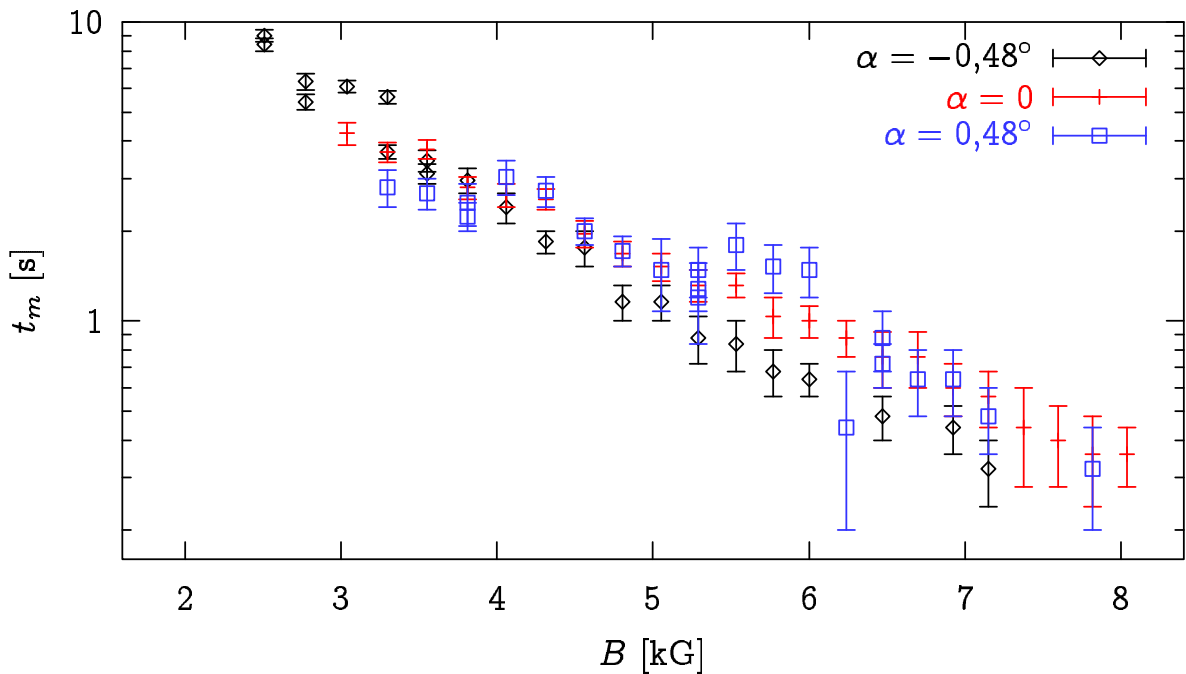


Figura 4.14: Dados experimentais relativos ao tempo necessário para atingir a máxima amplitude do modo linear para valores de  $\alpha$  próximo de zero.

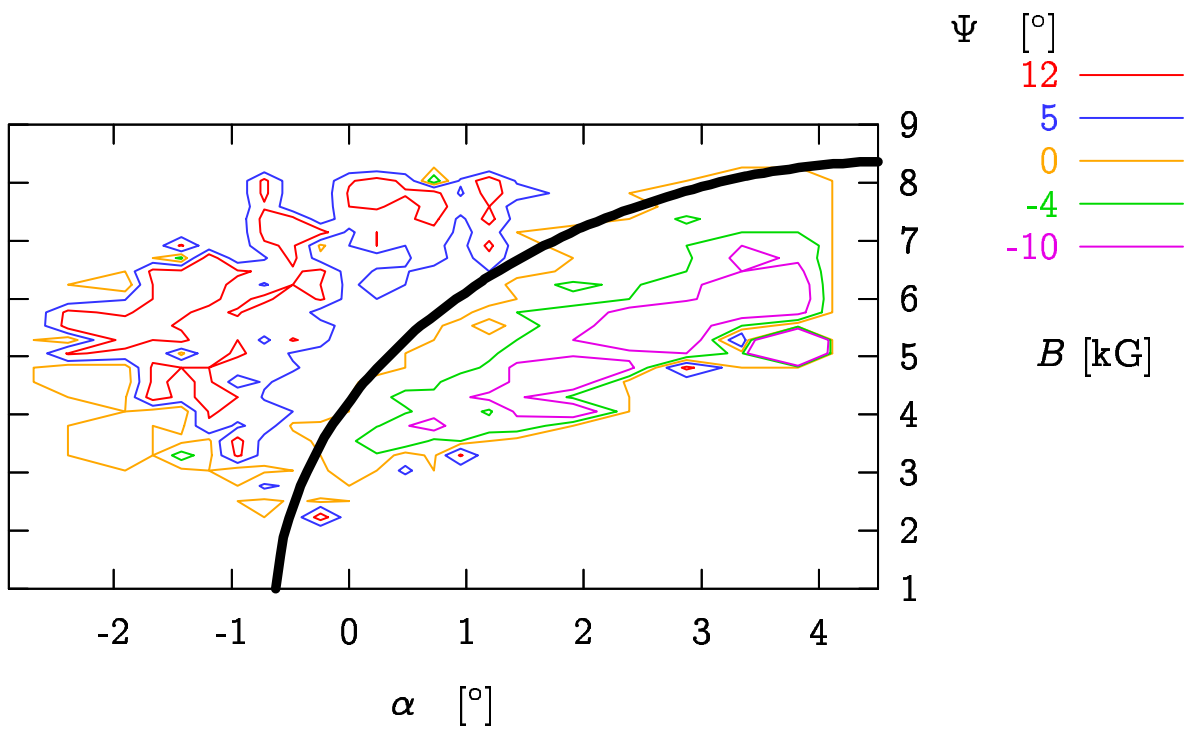


Figura 4.15: Linhas de contorno de  $\Psi(\alpha, B)$  experimental. Adicionalmente inclui-se uma representação da curva analítica  $\Psi(\alpha, B) = 0$ , a negro, que se ajusta aos dados experimentais (ver texto).

## 4.5 ANÁLISE DOS RESULTADOS

Nesta secção os resultados apresentados em §4.4.2 e em §4.4.3 são comparados com as previsões teóricas dos dois modelos apresentados em §3.6 e em §3.7, um devido a Srajer *et al.* e outro desenvolvido por nós (o nosso modelo). O modelo de Srajer prevê o comportamento dos modos linear e não-linear mas foi desenvolvido unicamente para a situação em que  $\alpha = 0$  e não toma em consideração a reorientação inicial do campo magnético que é responsável pela assimetria existente entre  $\alpha > 0$  e  $\alpha < 0$  na orientação da perturbação periódica (bandas). O nosso modelo toma em consideração a reorientação inicial do campo magnético mas devido à linearização das equações da nematodinâmica que utiliza só pode prever o comportamento do modo linear enquanto a amplitude deste modo se mantiver significativamente inferior à amplitude da reorientação homogénea.

Tal como observado experimentalmente (figuras 4.10, 4.11 e 4.12, por exemplo) a amplitude do modo linear passa por um valor máximo durante o processo de reorientação do campo do director num instante que designaremos  $t_m$ . É o valor do vector de onda no instante  $t_m$  e do próprio  $t_m$  que iremos comparar com as previsões dos modelos que prevêem para o modo linear um comportamento semelhante ao encontrado experimentalmente. Na figura 4.16 é apresentada a variação do vector de onda com o campo magnético obtida experimentalmente e a predita quer pelo modelo de Srajer quer pelo nosso modelo. É de salientar que quer no modelo de Srajer quer no nosso modelo não foram usados parâmetros de ajuste, tendo sido obtidas da literatura, as constantes visco-elásticas utilizadas para caracterizar o 5CB.

O nosso modelo permite também explicar o facto de as bandas só serem observáveis numa região estreita em torno de  $\alpha = 0$  pois, como a figura 4.17 mostra, a amplitude da perturbação periódica decai rapidamente com  $\alpha$  quando nos afastamos de  $\alpha = 0$ .

Na figura 4.18 esta representada a variação de  $t_m$  com o campo magnético para valores de  $\alpha$  distintos. O nosso modelo prevê tempos  $t_m$  com uma dependência no campo magnético semelhante à encontrada experimentalmente mas com valores absolutos

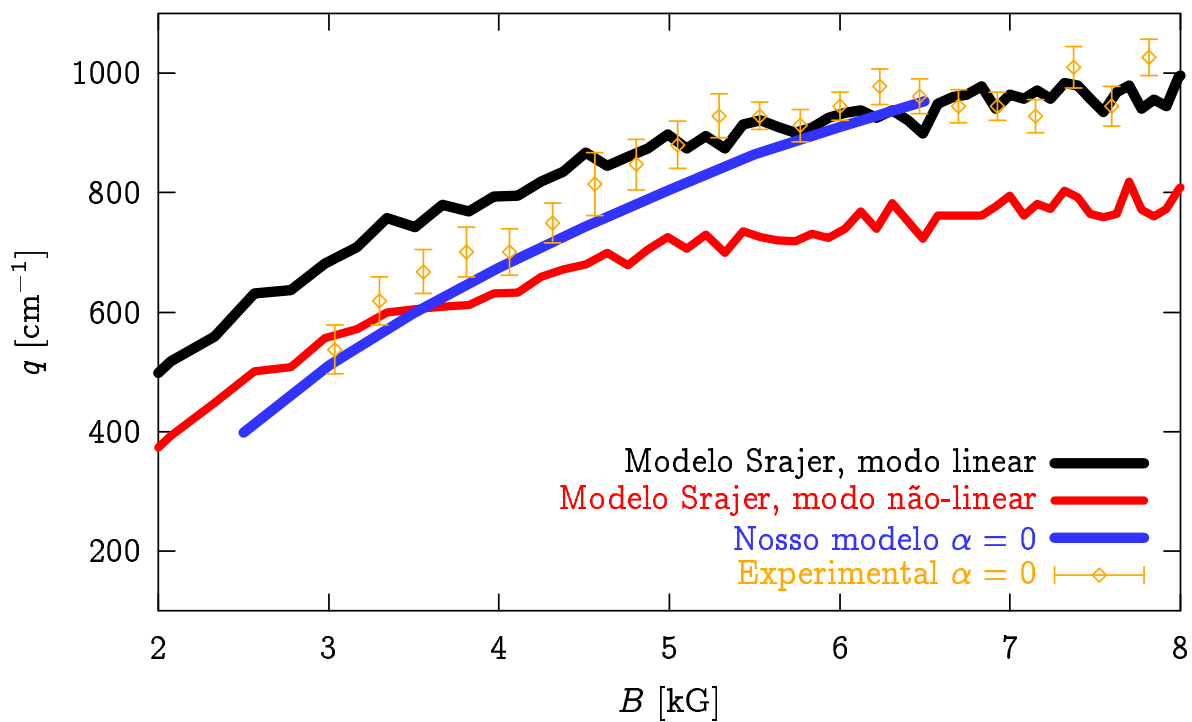


Figura 4.16: Dados experimentais, o nosso modelo e modelo Srajer para  $\alpha = 0$ .

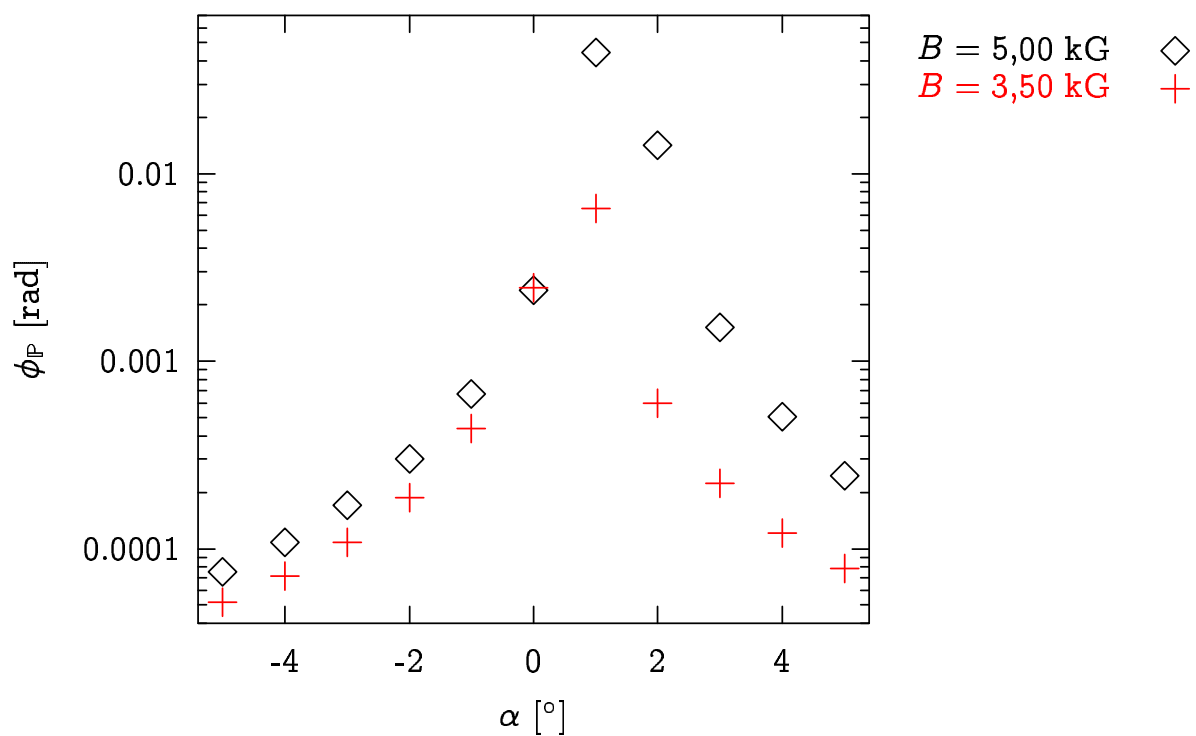


Figura 4.17: Previsões do nosso modelo para a amplitude da distorção periódica em função de  $\alpha$ .

inferiores e proporcionais aos valores experimentais. Este facto pode ser atribuído a uma sobre-estimação da amplitude inicial do modo correspondente à reorientação uniforme o que origina que a reorientação uniforme se dê mais rapidamente e provoque por isso o surgimento da estrutura periódica mais cedo.

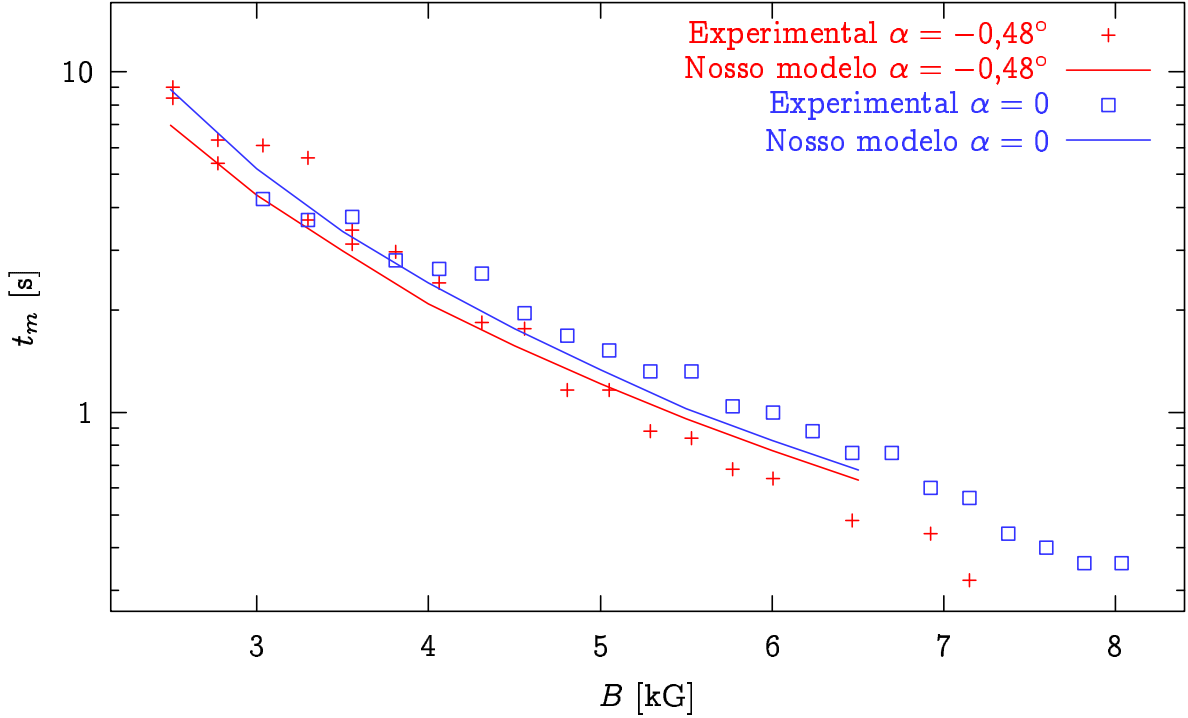


Figura 4.18: Previsões do nosso modelo para  $t_m(B)$  comparadas com os resultados experimentais. Os tempos do modelo encontram-se, neste gráfico, multiplicados por 1,5.

Em súpula, o nosso modelo permite prever  $q$ ,  $\Psi$ ,  $\phi_P$  e  $\phi_H$  em função do tempo para pares  $(B, \alpha)$  arbitrários. O instante  $t_m$  é a quele em que a amplitude da distorção periódica  $\phi_P(t)$  correspondente à amplitude espectral  $A(q, t)$  é máxima. Assim, no sentido de completar o conjunto de previsões do nosso modelo, apresentamos ainda  $\phi_P(B)$ ,  $\phi_H(B)$ ,  $\Psi(B)$ ,  $q(\alpha)$  e  $t_m(\alpha)$  nas figuras 4.19 e 4.20.

Como indicam os dados experimentais (§4.4.3) a inclinação das bandas não é simétrica em torno de  $\alpha = 0$ . Este facto tem a sua origem no processo de reorientação inicial do campo magnético. A comparação entre a curva  $\alpha(B)$ , para a qual o ângulo das bandas  $\Psi$  é nulo, prevista pelo nosso modelo com a curva obtida dos resul-

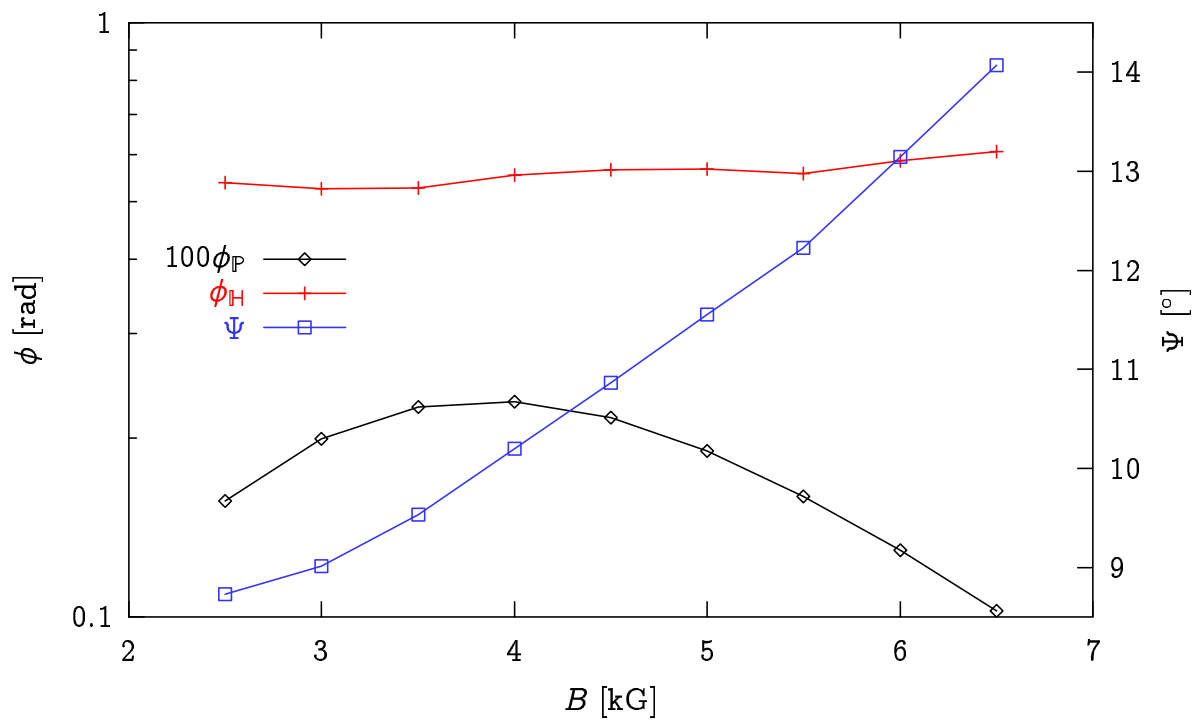


Figura 4.19: Previsões do nosso modelo para  $\phi_P(B)$ ,  $\phi_H(B)$  e  $\Psi(B)$  com  $\alpha = 0$ . É particularmente notória a existência de um valor para intensidade do campo magnético que otimiza a detecção das estruturas periódicas (maximiza  $\phi_P$ ).



tados experimentais (figura 4.15) proporciona um método de calibração do ângulo de rotação experimental  $\alpha$  como pode ser visto na figura 4.21. A curva téorica que melhor reproduz os valores experimentais corresponde a um tempo de rotação de 20 ms em acordo com as condições da montagem experimental. É também apresentada a relação  $\alpha(B)$  para um tempo de rotação de 40 ms que já se afasta significativamente da relação experimental. Na figura 4.22 é apresentada a comparação entre o ângulo  $\Psi$  medido experimentalmente e a sua previsão obtida pelo nosso modelo tomando em consideração o rescalamento de  $\alpha$  para um campo  $B = 5$  kG.

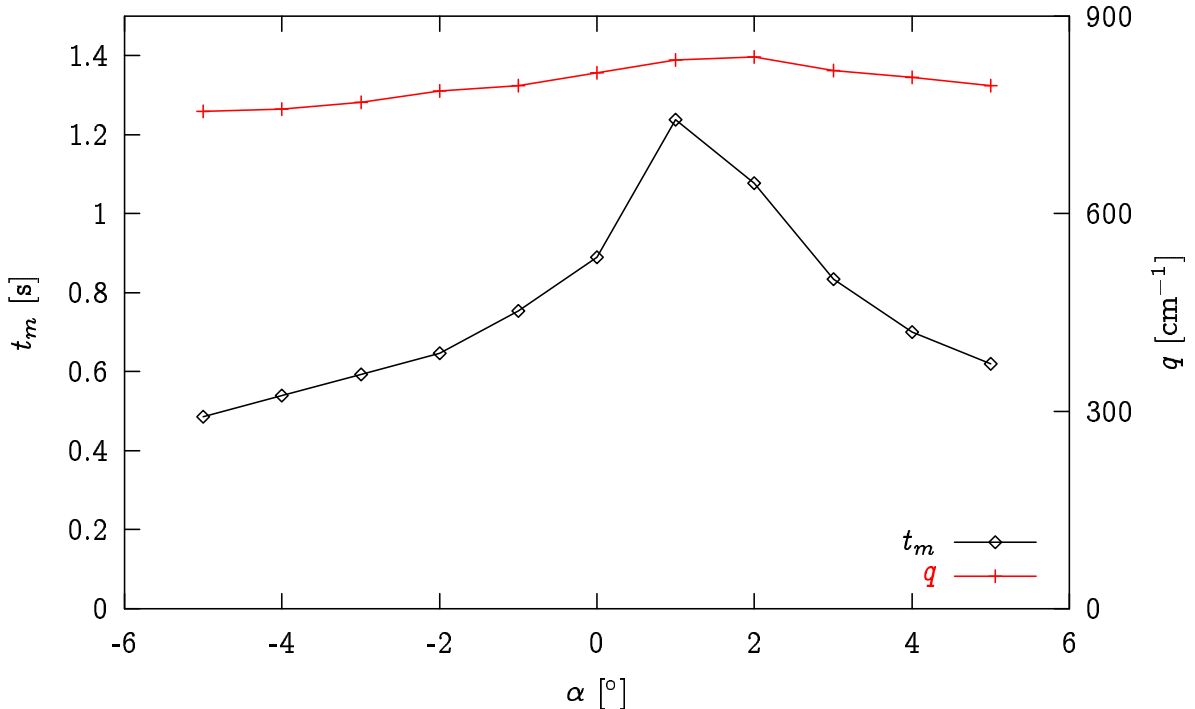


Figura 4.20: Previsões do nosso modelo para  $q(\alpha)$  e  $t_m(\alpha)$  com  $B = 5$  kG. Tal como anteriormente referido, é pouco significativa a dependência de  $q$  e de  $t_m$  em  $\alpha$ .

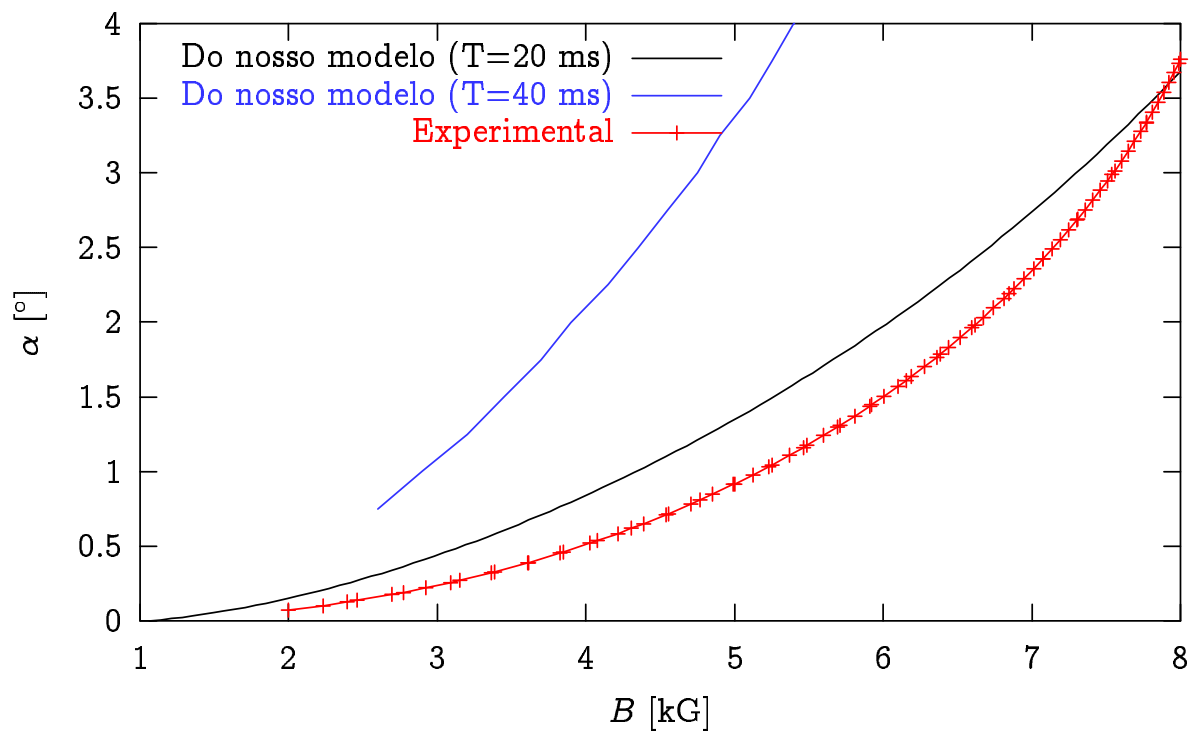


Figura 4.21: Curvas de calibração do posicionamento da escala de  $\alpha$ . O tempo  $T$  de duração da rotação súbita influencia fortemente os resultados do nosso modelo. A curva indicada como “Experimental” é a linha negra da figura 4.15 mas deslocada em  $\alpha$  por forma a cumprir  $\Psi(\alpha = 0, B^*) = 0$ . Lembre-se que este deslocamento é inferior à incerteza sistemática associada às medidas de  $\alpha$  ( $1^\circ$ ).

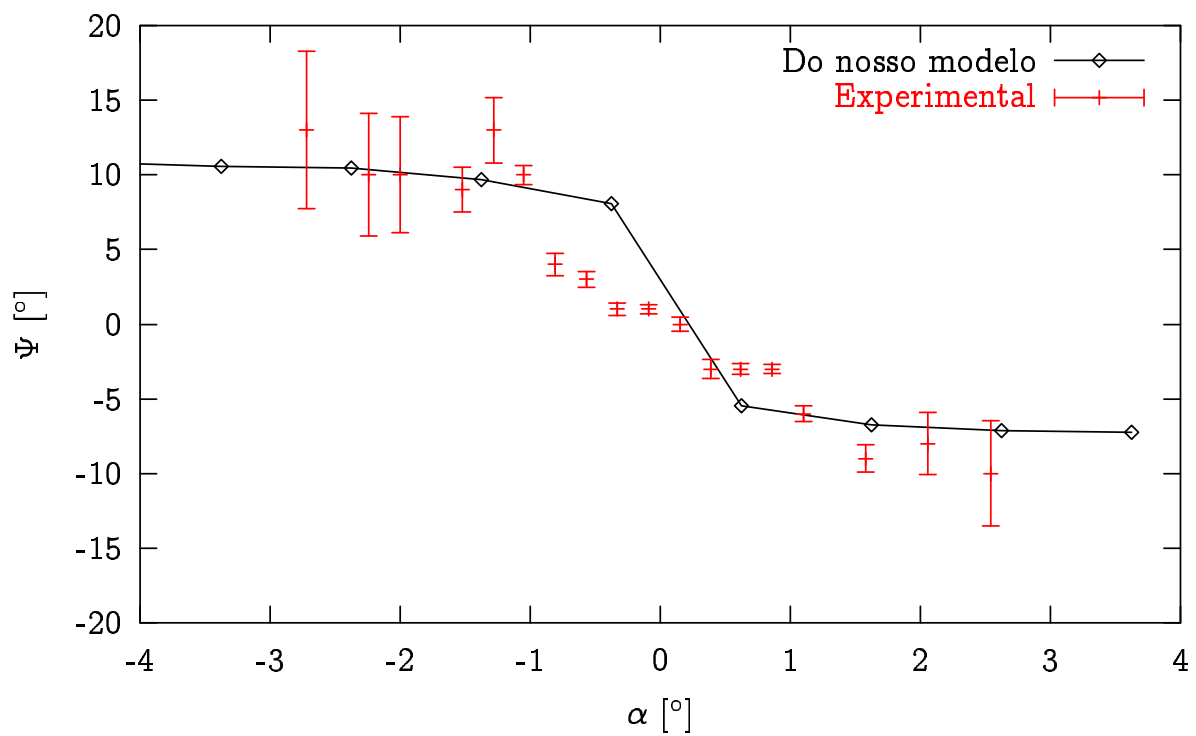


Figura 4.22: Andamento de  $\Psi(\alpha)$  a  $B = 5$  kG com reposicionamento da escala de  $\alpha$ . Os dados experimentais não traduzem o “degrau” previsto pelo nosso modelo.

# CAPÍTULO 5

## CONCLUSÕES

*Consummatum est*

Determinámos o campo crítico para a transição  $\mathbb{U}$ - $\mathbb{H}$  numa célula nemática planar sob condições fronteira rígidas com qualquer orientação de  $\vec{n}_0$  e de  $\vec{H}$  que respeite a condição  $\vec{H} \perp \vec{n}_0$  (2.29). A utilização de *ansätze* apropriados permite obter resultados analíticos para os campos críticos de Fréedericksz em condições de generalidade alargada.

Obtivémos mapas teóricos de transição, no espaço dos parâmetros  $\{\mathcal{M}, \mathcal{K}_{2/1}, \mathcal{K}_{1/3}, \gamma, \psi\}$ , entre as configurações  $\mathbb{U}$ ,  $\mathbb{H}$  e  $\mathbb{P}$  nas três geometrias intermédias (§2.3.7, §2.3.8 e §2.3.9). Em particular: (i) o ponto de Lifshitz a  $\mathcal{K}_{2/1} \simeq 0,3$  característico da geometria de afunilamento puro transforma-se num ponto bicrítico para  $\psi > 5,5^\circ$  na geometria de afunilamento-torção; (ii) em determinadas gamas dos parâmetros  $\{\mathcal{K}_{2/1}, \mathcal{K}_{1/3}, \gamma\}$  o campo crítico para a transição  $\mathbb{U}$ - $\mathbb{H}$  na geometria de afunilamento-flexão é inferior ao determinado pela expressão (2.20) devido à transição ocorrer indirectamente através da configuração  $\mathbb{P}$ ; (iii) quando  $\gamma \neq 0$  e simultaneamente  $\mathcal{K}_{1/3} \neq 1$  as transições são, em geral, descontínuas; (iv) na geometria de torção-flexão a transição  $\mathbb{U}$ - $\mathbb{H}$  pode ser contínua ou descontínua estando as duas regiões do espaço de parâmetros  $\{\mathcal{K}_{2/1}, \mathcal{K}_{1/3}\}$  separadas por linhas de pontos tricríticos; (v) nas geometrias intermédias de afunilamento-torção e torção-flexão a transição  $\mathbb{U}$ - $\mathbb{P}$  pode ser directa ou indirecta através do estado  $\mathbb{H}$ .

Observámos, simulámos e explicámos o fenómeno da reorientação magnética do campo do director nemático uniaxial não quiral com  $\chi_a > 0$  em células planares, na geometria de torção e com  $\vec{H}$  numa gama de ângulos próximos da perpendicularidade relativa a  $\vec{n}_0$ , desde configurações inicialmente uniformes até ao início da formação de paredes de flexão-afunilamento-torção (§4). Concluimos nomeadamente que: (vi) a rotação súbita da amostra no interior do campo magnético produz um efeito de “atraso” na orientação do vector de onda associado ao padrão de bandas; (vii) o ângulo de inclinação das bandas  $\Psi$  é, nos casos estudados, bastante maior em valor absoluto que o ângulo  $\alpha$  de desvio da perpendicularidade entre  $\vec{n}_0$  e  $\vec{H}$ ; (viii) as bandas tornam-se observáveis para intensidades do campo magnético tanto maiores quanto maior o desvio da perpendicularidade; (ix) o tempo necessário para que as bandas se tornem observáveis e o seu comprimento de onda diminuem quando aumenta a intensidade do campo magnético mas não variam significativamente com  $\alpha$ ; (x) dependendo de  $H$  e de  $\alpha$ , as bandas podem ou desaparecer da mesma maneira que surgiram ou transformarem-se em paredes; (xi) o tempo de vida do padrão periódico é fortemente dependente de  $\alpha$ ; (xii) o modelo por nós desenvolvido descreve os resultados experimentais encontrados nomeadamente em termos da variação do vector de onda do modo linear com o campo aplicado e com  $\alpha$ ; (xiii) o nosso modelo também explica a variação de  $\Psi$  com  $\alpha$ ; (xiv) o modelo de Srajer *et al.* que permite obter as dependências dos vectores de onda quer do modo linear quer do modo não-linear no campo magnético para  $\alpha = 0$  não produz um ajuste tão bom para a variação do modo linear como o nosso modelo.

# PERSPECTIVAS

*Non licet omnibus adire Corinthum*

Tendo em consideração que o sistema de análise de perturbações que utilizamos só permite obter resultados fiáveis na gama  $-1,5^\circ < \alpha < 1,5^\circ$ , torna-se necessário desenvolver um sistema que permita ampliar esta gama de ângulos nomeadamente através da melhoria significativa do sistema óptico e de registo de imagem assim como do sistema de rotação da amostra. Por outro lado, os métodos que foram aplicados tanto nos estudos teóricos como nos experimentais formam uma plataforma de conhecimento que nos permite perspectivar a sua extensão às geometrias de flexão e de afunilamento.

Inúmeras observações experimentais efectuadas produziram efeitos potencialmente interessantes. Entre outros efeitos observados mas não estudados encontram-se os seguintes:

## MOVIMENTO DE UMA PAREDE

Se, imediatamente após a rotação súbita da amostra, se rodar em sentido contrário, também subitamente, a amostra para a orientação inicial (com a aresta mais longa paralela ao campo magnético) forma-se junto a uma das arestas mais longas uma parede que se desloca uniformemente para o centro da amostra.

## ESTÁGIO FINAL DAS PAREDES

As paredes de flexão-afunilamento-torção decaem para uma estrutura de anéis alongados que parece evoluir por forma a minimizar os perímetros respectivos. No entanto, quando os anéis se tornam circulares e com um raio suficientemente pequeno, observa-se um incremento temporário no brilho da luz e o defeito

desaparece.

## ANÉIS DE RAIOS CONTROLADOS

Como uma situação intermédia entre as duas descritas anteriormente, caso após a formação de paredes estáveis se rodar a amostra de um pequeno ângulo e, imediatamente a seguir, se regular a intensidade do campo magnético, é possível obter anéis estáveis. Só se obtém este resultado em certas gamas de ângulo e de campo magnético e este último tem intensidade dependente do ângulo. Fora do valor certo da intensidade do campo, os anéis ou crescem ou decrescem.

Estes efeitos envolvem gradientes elevados do campo do director e não podem ser estudados no âmbito da clássica energia livre de Frank. Por outro lado, os estudos experimentais efectuados restringiram-se à geometria de torção. Assim, no sentido de estudar não só as geometrias de afunilamento e de flexão mas também todo o tipo de efeitos no campo do director perspectivam-se os desenvolvimentos descritos a seguir.

## DESENVOLVIMENTOS

O objectivo é aperfeiçoar e desenvolver os instrumentos teóricos e experimentais que nos permitam estudar o fenómeno da reorientação magnética de maneira mais abrangente do que o conhecido do passado.

## INSTRUMENTOS TEÓRICOS

Uma extensão da energia livre de Frank que inclui o parâmetro de ordem foi publicada por Ericksen [30]. Os nossos *ansätze* podem também ser estendidos para suportar e aproveitar esta extensão.

Desenvolvimentos recentes na teoria dos gases de rede [7, 23] enquadram-se perfeitamente no estudos perspectivados e sugerem a possibilidade de implementar sistemas de simulação baseados em *clusters*.

## INSTRUMENTOS EXPERIMENTAIS

O principal constrangimento no *design* da actual montagem experimental é o reduzido espaço no entreferro do nosso electromagneto. Submetemo-nos a este constrangimento por considerarmos importante a aplicação de campos magnéticos muito intensos. Isto deve-se à pretensão de estudar polímeros líquidos cristalinos. A necessidade de possuir informação sobre os parâmetros viscoelásticos levou-nos a preferir nemáticos de baixo peso molecular. Um ponto que se revela como verdadeiramente importante é a obtenção de imagens de alta resolução. Por outro lado revela-se desnecessário produzir campos muito intensos pois existe saturação a campos baixos. Afigura-se desejável o desenvolvimento de um novo electromagneto baseado na tecnologia de campo cíclico e de um novo sistema óptico baseado em lentes *Tilt-and-Shift*\* ou com focagem *scheimpflug* [36].

---

\*Por exemplo, a lente C A N O N TS-E 90mm.



# APÊNDICE A

## CD

Esta tese deve ser acompanhada por dois CDs intitulados “LNGsoft” e “MPEG1” contendo respectivamente *software* e sequências de imagens. Em qualquer caso, indicações como

```
src/latex/thesis/can.tex
```

identificam um *caminho* que atravessa sequencialmente as directorias `src`, `latex` e `thesis` até encontrar o ficheiro `can.tex`, sendo assumido que o caminho começa sempre na raiz do CD.

### A.1 CÓDIGO-FONTE

Todo o código-fonte desenvolvido durante o trabalho desta tese e a maioria dos dados experimentais obtidos foram gravados no CD “LNGsoft”. Este CD permite reproduzir todos os cálculos e toda a documentação relacionada com esta tese, no entanto, a quantidade de programas e a diversidade de linguagens de programação utilizados excede a nossa disponibilidade para os descrever sistematicamente. Mesmo assim, o CD designado “LNGsoft” constitui um alargado repositório de exemplos de programação, nomeadamente nas linguagens:

G N U P L O T — Ficheiros de extensão `.gnu` na directoria `src/plots/plota/`

L<sup>A</sup>T<sub>E</sub>X — src/latex/

C — Exemplos de utilização da biblioteca `imlib` para manipulação de imagens em  
src/c/imlibmpeg/

M A P L E — src/algebra/mainstuff/

METAPOST — src/metast/metapost/

html — www/

## A.2 CODIFICAÇÃO DOS NOMES DOS FICHEIROS DE DADOS EXPERIMENTAIS

Em §4 são referidas sequências de imagens no formato `mpeg1` (contidas no CD “MPEG1”) através de uma codificação dos nomes dos ficheiros respectivos. Explicamos aqui o esquema de codificação. Por exemplo:

7CBm04075S17

quer dizer fotograma número 17 da sequência relativa à amostra de 7CB obtida com  $\alpha = -0,24 \times 4$  (“m” de *minus* e “p” de *plus*),  $H$  correspondente a uma corrente de 75 deciampères (ver §C para converter em intensidade do campo magnético) e cujos fotogramas têm uma resolução de  $640 \times 480$  para uma taxa de aquisição de 5 fotogramas por segundo (FPS). A resolução e a taxa de aquisição são codificadas numa única letra de acordo com a tabela seguinte

Letra	Resolução	Taxa de aquisição
L, M, N, etc.	$640 \times 480$	25FPS
S, T, U, etc.	$640 \times 480$	5FPS
A, B, C, etc.	$320 \times 240$	25FPS

O código 7CBm04075S corresponde ao ficheiro de nome 075S.m1v que se encontra na directoria 7CB/m04 do CD com a etiqueta “MPEG1”.

# APÊNDICE B

## FILTROS DE SAVITZKY-GOLAY

Estes filtros mostraram-se bastante úteis, entre outras aplicações, na redução do ruído numérico gerado durante a resolução das equações (3.58) e (3.59) e que produziu as curvas relativas ao modelo de Srajer na figura 4.16.

Os filtros de Savitzky-Golay [75, §14.8], [37, 77, 82] constituem um método expedito para suavizar funções discretizadas e corrompidas por ruído, por exemplo, uma função  $y = f(x)$  pode ser aproximada a partir de dados experimentais na seguinte forma:

$$y_i = f(x_i), \quad x_i = x_0 + i\Delta x, \quad i = 0, \dots, n \quad (\text{B.1})$$

Supõe-se que os dados  $y_i$  contêm ruído e que este pode ser suavizado ajustando, por mínimos desvios quadrados, um polinómio aos dados. Os aspectos fundamentais do método de Savitzky-Golay são: (i) o ajuste é efectuado  $n + 1$  vezes em troços de  $k \sim 10$  pontos; (ii) o resultado dos ajustes é uma função  $g(y_{i+1}, \dots, y_{i+k})$  que não depende de  $i$ , ou seja, a função  $g$  é determinada apenas uma vez; (iii) como são usados polinónios, facilmente se obtêm derivadas de  $f$ .

Devido à omnipresença de ruído nas simulações e nos dados experimentais escrevemos um programa em `M A P L E` para obter expressões analíticas de  $g$ . Trata-se do ficheiro [lsq34.com](http://lsq34.com)\* que contem os procedimentos:

---

\*[src/algebra/mainstuff/lsq34.com](http://src/algebra/mainstuff/lsq34.com)

`finitedifference(k, M)` Determina  $f^{(m)}(x)$ ,  $m = 0, \dots, M$  no ponto central e no ponto extremo de troços com  $k$  pontos por ajuste de um polinómio de grau  $M$ .

`robustcrossderiv(N, T)` Determina a derivada cruzada  $\partial_{xt}f(x, t)$  no ponto central em  $x$  e extremo em  $t$  de um rectângulo de  $(2N + 1) \times T$  pontos por ajuste de um polinómio de grau dois. É muito importante um cálculo “suave” das derivadas cruzadas nas equações (3.58) e (3.59).

`imagepolinfilter(N, M)` Determina  $f(x, y)$  no centro de um quadrado com  $(2N + 1)^2$  pontos por ajuste de um polinómio de grau  $M$ . Esta expressão foi usada na filtragem dos fotogramas dos filmes.

Como exemplo, apresentamos expressões deduzidas com o procedimento `finitedifference` para  $k = 5$  com ajuste de polinómio de grau dois

$$y'_3 = \frac{-2y_1 - y_2 + y_4 + 2y_5}{10\Delta x} \quad (\text{B.2})$$

e para um polinómio de grau três.

$$y'_3 = \frac{y_1 - 8y_2 + 8y_4 - y_5}{12\Delta x} \quad (\text{B.3})$$

Em ambos os graus obtemos

$$y''_3 = \frac{2y_1 - y_2 - 2y_3 - y_4 + 2y_5}{7(\Delta x)^2} \quad (\text{B.4})$$

Um aspecto curioso consiste em obter-se, para um dado  $k$ , igualdade entre a expressão da derivada de ordem igual ao grau e a expressão da derivada central da mesma ordem mas para grau imediatamente superior.

# APÊNDICE C

## CALIBRAÇÃO DO ELECTROMAGNETO

A conversão entre as marcações do potenciómetro da fonte de alimentação do electromagneto e o valor da intensidade do campo magnético baseia-se em dois conjuntos de dados:

- Dados obtidos do amperímetro acoplado à fonte de alimentação. Estes dados constituem uma tabela de correspondência entre valor marcado no potenciómetro e corrente (ver o ficheiro `magnknobcurr.dat`<sup>\*</sup> com valores em deciamperes).
- Dados da curva de calibração. Estes dados constituem uma tabela de correspondência entre valor de corrente e intensidade do campo magnético em kG (ver ficheiro `magnfield.dat`<sup>†</sup>).

Não é prático, de cada vez que se pretende conhecer a intensidade do campo magnético, estar a consultar tabelas e efectuar interpolações. Por isso, foi desenvolvido um simples programa de conversão (ver `knob2kG.c`<sup>‡</sup>) através de um procedimento algo elaborado que se encontra sintetizado no programa `G N U P L O T` do ficheiro `magnconvplot.gnu`<sup>§</sup>.

O procedimento é o seguinte:

---

<sup>\*</sup>`src/plots/plota/mp/magnknobcurr.dat`  
<sup>†</sup>`src/plots/plota/mp/magnfield.dat`  
<sup>‡</sup>`src/c/other/knob2kG.c`  
<sup>§</sup>`src/plots/plota/mp/magnconvplot.gnu`

1. É ajustado, por mínimos desvios quadrados, um polinómio da forma

$$g(x) = x(d + hx + ix^2) \tag{C.1}$$

aos dados do amperímetro.

2. É ajustado, por mínimos desvios quadrados, um polinómio da forma

$$f(x) = x(a + bx + cx^2) \tag{C.2}$$

aos dados da curva de calibração.

3. A função composta  $f(g(x))$  constitui um polinómio de grau nove que truncamos para grau cinco.
4. A função de conversão  $j(x)$  é obtida da anterior mantendo apenas três algarismos significativos em cada coeficiente.

Tal como se pode verificar na figura [C.1](#) os dois últimos passos do procedimento introduzem um desvio quase invisível na função de conversão. Estes dados permitem-nos assegurar uma incerteza máxima de 100 G nos valores da intensidade do campo magnético.

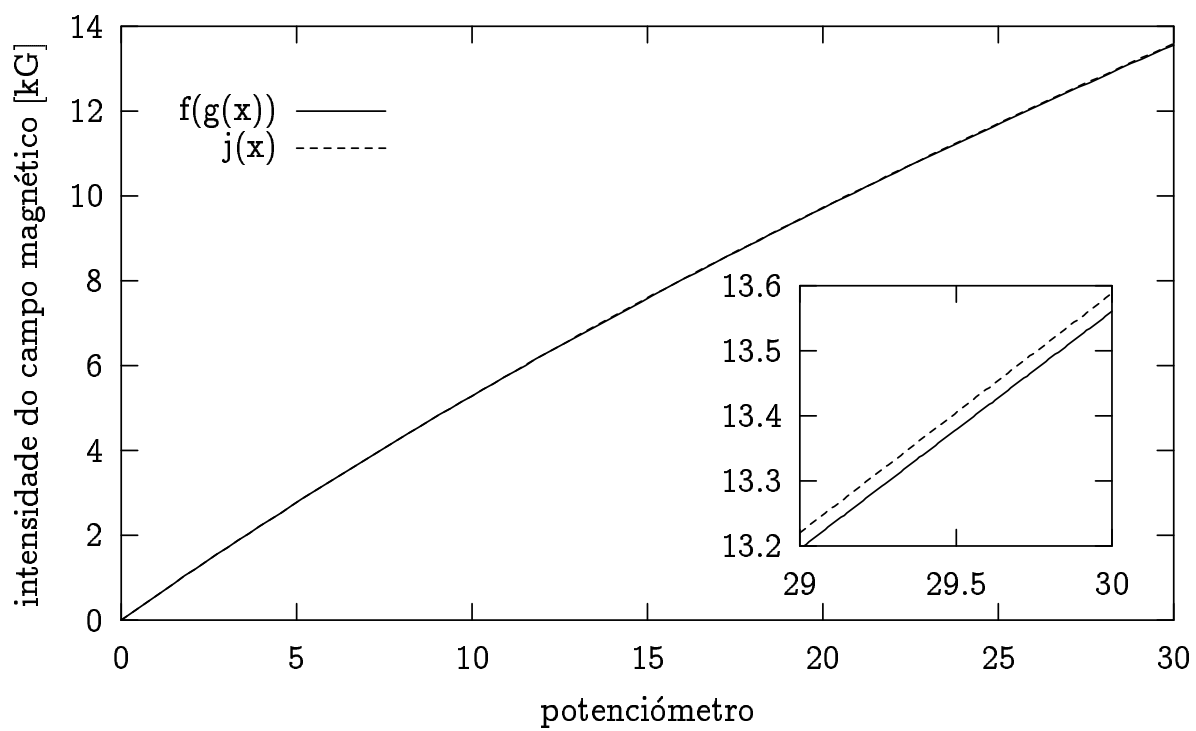


Figura C.1: Gráfico de conversão regulador-campo.



# APÊNDICE D

## TRANSFORMADAS DE HOUGH

A transformada de Hough [39, §3.7] baseia-se no conceito de “células de acumulação” no espaço dos parâmetros. No nosso caso particular temos um único parâmetro que é o ângulo  $\Psi$  de inclinação das bandas. Transformamos fotografias em histogramas de variável  $\Psi$ . O procedimento, que se repete cerca de cem mil vezes em cada fotografia, é o seguinte:

1. Escolhe-se aleatoriamente um píxel e regista-se a sua cor.
2. Escolhe-se aleatoriamente um ângulo ( $\alpha$ ).
3. Escolhe-se aleatoriamente uma distância ( $l$ ).
4. Regista-se a cor do píxel que se encontra à distância  $l$ , sobre uma recta de inclinação  $\alpha$ , do primeiro.
5. A diferença de cores dos dois píxeis é acrescentada ao valor acumulado na célula (ou classe) correspondente ao valor  $\alpha$ .

Usamos uma gama de distâncias  $l$  para reduzir o efeito da não-uniformidade da distribuição de píxeis em ângulo. Usamos também filtros de Savitzky-Golay (§B) para alisar os histogramas (ver figura D.1). O ângulo de inclinação das bandas é o que corresponde à célula de menor valor acumulado (menor diferença de cor). Associamos a incerteza de  $\Psi$  à largura do rectângulo que tem a mesma área e profundidade do vale do histograma

em que se encontra o mínimo. O programa `il41measure_angle_ns.c`\* exemplifica a implementação do procedimento descrito.

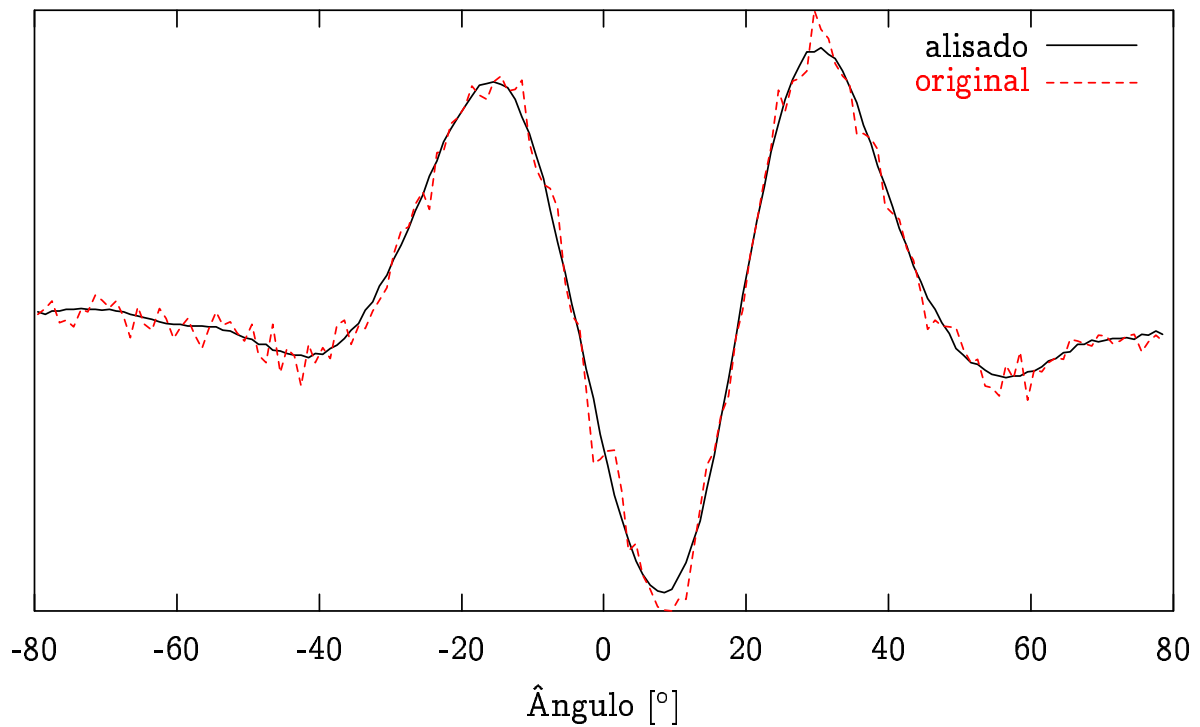


Figura D.1: Exemplo da transformada de Hough de um fotograma. Trata-se de um tipo especial de histograma onde cada classe é uma “célula de acumulação” de uma propriedade fortemente correlacionada com a grandeza a determinar. No nosso caso acumulamos diferenças de nível de cinzento entre os dois píxeis de pares posicionados em rectas inclinadas do ângulo correspondente a cada classe.

---

\*`src/c/imlibmpeg/il41measure_angle_ns.c`

# APÊNDICE E

## AMOSTRAS

- 1 E7, verniz das unhas
- 2 E7, UHUallplast
- 3 MBBA, epoxy-bison5
- 4 MBBA, epoxy-bison5, muito ar
- 5 MBBA, mastique epoxy (M.E)
- 6 5CB, M.E, não utilizável em 2000/12/18.
- 7 MBBA, M.E,  $\approx$  1mm, água, bolha
- 8 PBLG/m-cresol 20.27%, 150000g/mol, M.E, 6 semanas depois da selagem estava degradada
- 9 PBLG/m-cresol 20.27%, 150000g/mol, M.E, 1999/Set/9, a 20 de Outubro estava degradada
- 10 5CB, M.E., 1999/11/4, apresentou bandas no dia 1999/11/5 em apenas três ensaios, aparentemente, deve-se efectuar a rotação imediatamente a seguir a ter subido o campo até  $18A \approx 9KGauss$ . Estava provavelmente em início de degradação provocada por pequena fuga. No dia 1999/12/21 apresentava grandes bolhas. Passou a ser usada como amostra de teste óptico.
- 11 5CB, M.E., 2000/01/31, pequena gota no exterior, rolinhos finais de mastique epoxy demasiado grossos, ideia de colocar vedante de acabamento tipo tinta de

- óleo. Levou duas marcas de corrector no vidro superior para se obter contraste da sombra e ajudar no alinhamento das lentes.
- 12 5CB, tinta Marabu Hobbytex Magic-Liner (Schwarz 673), 2000/02/09, alguma diluição no 5CB, fuga aparente, dois dias no exterior seguidos de 10 dias no frigorífico que ajuda na estabilidade, posteriormente levou uma gota da Magic-Liner no sítio da fuga mas sem aquecimento. A 11 de Outubro serviu para testar medição da espessura das amostras no Centro de Física Molecular do Complexo do IST.
  - 13 5CB, M.E., 2000/02/21, pintura selante a tinta de óleo Rembrandt 118 branco titânio (óleo de linho) seguida de aquecimento, o mastique dilatou e descolou durante o aquecimento, a tinta ficou a borbulhar e o 5CB escoou para fora, a tinta nao secou bem, foi azar.
  - 14 5CB. M.E., 2000/02/22, acabamento selante a verniz das unhas Burgeois transparente. Em 2000/12/18 apresentava um abolha suspeita a ocupar o espaço entre dois espaçadores.
  - 15 PBLG/m-cresol 20.27%, 150000g/mol, 2000/03/15, resina epoxídica Bison Combi-Rapid nos dois lados maiores com a amostra em cima de papel branco, cura na estufa a 44 graus durante meia hora, cristal líquido transferido com a micro-pipeta, mastique epoxy nos lados menores, acabamento selante a verniz das unhas Burgeois transparente. No dia 20 de Março apresentava algumas bolhinhas.
  - 16 5CB que esteve cristalizado no frigorífico. 2000/03/15, resina epoxídica Bison Combi-Rapid nos dois lados maiores com a amostra em cima de papel branco, cura na estufa a 44 graus durante meia hora, cristal líquido transferido com a micro-pipeta, mastique epoxy nos lados menores, acabamento selante a verniz das unhas Burgeois transparente. Manteve-se sem alteração significativa pelo menos até ao início do ano 2001. No dia 9 de Janeiro de 2001, após vários ciclos de aquecimento-arrefecimento para induzir mudanças de fase nemático-isotropo levados a cabo nos dois dias anteriores, apresentava uma textura pontilhada de

- defeitos. Azar.
- 17 2000/06/23, resina epoxídica Bison Combi-Rapid nos dois lados maiores com a amostra em cima de papel branco, cura na estufa a 58 graus durante mais de uma hora. 2000/08/18 MBBA transferido com a micro-pipeta, mastique epoxy nos lados menores, acabamento selante a verniz das unhas Burgeois transparente. Em 2000/08/21 já apresentava sinais de degradação. Em 2000/08/25 já estava degradado.
  - 18 2000/06/23, resina epoxídica Bison Combi-Rapid nos dois lados maiores com a amostra em cima de papel branco, cura na estufa a 58 graus durante mais de uma hora. 2000/08/18 E7 transferido com a micro-pipeta, mastique epoxy nos lados menores, acabamento selante a verniz das unhas Burgeois transparente. Em 2000/08/21 apresentava apenas uma pequena bolha num canto. Em 2000/08/25 funcionou muito bem (mais viscoso que 5CB, permite estabilizar defeitos circulares que aumentam em paralelo e param na perpendicular, permite a utilização do martelo).
  - 19 2000/06/23, resina epoxídica Bison Combi-Rapid nos dois lados maiores com a amostra em cima de papel branco, cura na estufa a 58 graus durante mais de uma hora. 2000/08/18 PBLG/m-cresol 20.27%, 150000g/mol, transferido com a micro-pipeta, mastique epoxy nos lados menores, acabamento selante a verniz das unhas Burgeois transparente. Em 2000/08/21 apresentava cinco pequenas bolhinhas em regiões periféricas. Funcionou bem em 2000/08/25 e 28. Em 2000/09/27 apresentava bolhas grandes junto aos lados mais curtos.
  - 20 2000/06/23, resina epoxídica Bison Combi-Rapid nos dois lados maiores com a amostra em cima de papel branco, cura na estufa a 58 graus durante mais de uma hora. 2000/11/3 7CB deitando pedacinhos do cristal do frasco original para outro frasco que, aquecendo passa a nemático a 30 graus e depois a isotropo, transferindo com a micro-pipeta para a célula que foi selada com resina epoxídica Bison Combi-Rapid.

- 21 2000/06/23, resina epoxídica Bison Combi-Rapid nos dois lados maiores com a amostra em cima de papel branco, cura na estufa a 58 graus durante mais de uma hora. 2001/01/02, PBLG/m-cresol 6.86%, 26000g/mol, selado com resina epoxídica Bison Combi-Rapid. Parece não produzir bandas.
- 22(A) 2001/01/02, resina epoxídica Bison Combi-Rapid nos dois lados maiores com a amostra em cima de papel branco, cura na estufa a 54 graus durante mais de uma hora. 2001/01/09 5CB selado com MET angiohesive 782 (curado durante cinco minutos com ambas as lâmpadas UV do laboratório de química - “short and long wavelength”).
- 23(B) 2001/01/02, resina epoxídica Bison Combi-Rapid nos dois lados maiores com a amostra em cima de papel branco, cura na estufa a 54 graus durante mais de uma hora.
- 24(C) 2001/01/02, resina epoxídica Bison Combi-Rapid nos dois lados maiores com a amostra em cima de papel branco, cura na estufa a 54 graus durante mais de uma hora.
- 25(E) 2001/01/02, resina epoxídica Bison Combi-Rapid nos dois lados maiores com a amostra em cima de papel branco, cura na estufa a 54 graus durante mais de uma hora. 2001/06/27 5CB selado com MET angiohesive 782 (curado durante cinco minutos com ambas as lâmpadas UV do laboratório de química - “short and long wavelength”). A resina espalhou-se no vidro de cima devido a um pedacinho de papel de alumínio para proteger dos UV's e infiltrou-se no papel branco de reflexão. Restou uma pequena área suficiente para a visualização.

# APÊNDICE F

## SISTEMA GAUSSIANO DE UNIDADES

A equação (1.7) para a densidade de energia magnética que aqui reproduzimos

$$f_m = -\frac{1}{2}\chi_a(\vec{n} \cdot \vec{H})^2$$

contem a anisotropia da susceptibilidade magnética  $\chi_a$ , o director  $\vec{n}$  e o campo magnético  $\vec{H}$ . No entanto, esta equação não está escrita de acordo com o Sistema Internacional de Unidades e, por consequência, carece de esclarecimentos.

A indução magnética é

$$\begin{aligned}\vec{B} &= \mu\vec{H} \\ &= \mu_0\vec{H} + \mu_0\vec{M} \\ &= \mu_0\vec{H} + \mu_0\chi_H\vec{H} \\ &= \mu_0(1 + \chi_H)\vec{H} \\ &= \mu_0\mu_r\vec{H}\end{aligned}\tag{F.1}$$

em que  $\mu$  é a permeabilidade,  $\mu_0$  é a permeabilidade do vazio,  $\mu_r$  é a permeabilidade relativa,  $\chi$  é a susceptibilidade magnética,  $\vec{M}$  é a magnetização e  $\vec{H}$  o campo magnético.

Nos materiais que estudámos

$$\mu_r \approx 1\tag{F.2}$$

e

$$\vec{B} \approx \mu_0\vec{H}\tag{F.3}$$

donde se obtem

$$\vec{M} = \chi_H \vec{H} \approx \frac{1}{\mu_0} \chi_H \vec{B} \quad (\text{F.4})$$

Agora, como no sistema Gaussiano de unidades [42, 51, 86] se tem

$$\mu_0 = 1 \quad (\text{F.5})$$

ficamos com

$$\vec{M} = \chi_H \vec{H} \approx \chi_H \vec{B} \quad (\text{F.6})$$

Os campos  $\vec{B}$  e  $\vec{H}$  são intermutáveis.

Por outro lado, omitindo o índice  $H$ , a susceptibilidade de um nemático é um tensor  $\vec{\chi}$  que, num referencial alinhado com o director  $\vec{n}$ , se pode escrever

$$\vec{\chi} = \begin{pmatrix} \chi_1 & 0 & 0 \\ 0 & \chi_2 & 0 \\ 0 & 0 & \chi_3 \end{pmatrix} \quad (\text{F.7})$$

Se, adicionalmente, o nemático for uniaxial e se tivermos  $\vec{n} = \hat{u}_3$  ou  $\vec{n} = -\hat{u}_3$ , em que  $\hat{u}_3$  é o terceiro versor do referencial, então escrevemos

$$\vec{\chi} = \begin{pmatrix} \chi_{\perp} & 0 & 0 \\ 0 & \chi_{\perp} & 0 \\ 0 & 0 & \chi_{\parallel} \end{pmatrix} \quad (\text{F.8})$$

ou

$$\vec{\chi} = \begin{pmatrix} \chi_{\perp} & 0 & 0 \\ 0 & \chi_{\perp} & 0 \\ 0 & 0 & \chi_{\perp} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \chi_a \end{pmatrix} \quad (\text{F.9})$$



em que  $\chi_a = \chi_{\parallel} - \chi_{\perp}$  é a anisotropia da susceptibilidade magnética. Assim, a equação (F.6), fica simplificada para

$$\vec{M} = \chi_{\perp} \vec{H} + \chi_a (\vec{H} \cdot \vec{n}) \vec{n} \quad (\text{F.10})$$

permitindo-nos determinar a densidade de energia livre magnética:

$$f_m = - \int_0^{\vec{H}} \vec{M} \cdot d\vec{H}' = -\frac{1}{2} \chi_{\perp} \vec{H}^2 - \frac{1}{2} \chi_a (\vec{n} \cdot \vec{H})^2 \quad (\text{F.11})$$

Mais uma vez, são omitidos os termos independentes de  $\vec{n}$  e obtemos a equação (1.7), válida no sistema Gaussiano de unidades.

# APÊNDICE G

## CITAÇÕES LATINAS

Todas as citações latinas incluídas nesta tese foram seleccionadas das descritas em [80].

Transcrevo um trecho do prefácio desta referência:

A hora dolorosa, que vive o mundo, em que, de entre as inúmeras sombras que o torturam e apavoram, sobressai a da crescente obsessão das circunstâncias e condições materiais da existência, impõe clama — (e este grito vem de toda a parte, ergue-se do recanto mais íntimo do peito de nós todos, atormenta a nossa razão, adelgaça percute a nossa sensibilidade) — que se acarinhe tudo quanto se revista de valor moral, os fundamentos da nossa individualidade, a contextura das nossas tradições, os motivos de perenidade, em detrimento dos meros aspectos daquilo que é transitório e caduco, terreno e instável.

Este texto foi escrito em 1955, por Sebastião Pestana.

*Et propter vitam, vitæ perdere causas*

*Para viver, perder o que é a razão de ser na vida* (expressão que exprime a opinião do poeta Juvenal, *Sátiras*, VIII, 84—de que a honra é a razão mais mais forte, que temos, de viver).

*Ab Jove principium*

*Principiemos por Júpiter*, isto é, comecemos pelo primeiro personagem, pela parte mais importante. (Virgílio — *Éclogas*, III 60).

*Delenda Cartago*

*Cartago deve ser destruída*. Palavras com que Catão, o Antigo, (Florus, *Hist. rom.* II, 15) encerrava todos os seus discursos e que, figuradamente, se citam como exemplo de uma ideia fixa, dum plano ou projecto cuja realização se promove obstinadamente.

*Primo avulso, non deficit alter*

*Arrancado o primeiro, não deixa de se apresentar logo outro*, isto é: removida uma dificuldade, logo outra surge. (Virgílio, *Eneida*, VI, 143).

*Paulo majora canamus*

*Cantemos coisas um pouco mais importantes*. (Expressão de Virgílio — *Éclogas*, IV, 1 — que se emprega para fazer a transição de um assunto para outro de natureza mais elevada).

*Vox faucibus hæsit*

*A voz parou (na minha) garganta*. (Expressão de Virgílio — *Eneida*, III, 48 — colocada pelo poeta na boca de Eneias quando conta o efeito, que sentira à vista de um prodígio, expressão que se emprega para significar espanto, terror).

*Consummatum est*

*Está consumado, tudo acabou* (últimas palavras de Cristo pregado na cruz, para dar a entender que estava assim concluído o seu cruento sacrifício — segundo o Evangelho de *S. João*, XIX, 30).

*Non licet omnibus adire Corinthum*

*Nem a todos é permitido ir a Corinto* (Nesta cidade os prazeres eram tão caros que nem todos podiam ir residir para lá; emprega-se esta frase, quando, por falta de meios, temos de renunciar a certas coisas, por serem muito dispendiosas).

# APÊNDICE H

## ARTIGOS PUBLICADOS

Incluimos reproduções das referências [11, 32].

# BIBLIOGRAFIA

- [1] Guenter Ahlers. Experiments on thermally driven convection. In Agnes Buka e Lorenz Kramer, editores, *Pattern Formation in Liquid Crystals*, capítulo 5. Springer, 1996. Physical Properties of 5CB in Appendix B.
- [2] D. W. Allender, R. M. Hornreich, e D. L. Johnson. Theory of the stripe phase in bend-Fredericksz-geometry nematic films. *Physical Review Letters*, 59(23):2654–2657, 1987.
- [3] Henryk Arodź e Joachim Stelzer. Director configuration of planar solitons in nematic liquid crystals. *Physical Review E*, 57(3):3007–, March 1998.
- [4] G. Barbero e L. R. Evangelista. *An Elementary Course on the Continuum Theory for Nematic Liquid Crystals*, volume 3 da série *Liquid Crystals*. World Scientific, 2001.
- [5] D. W. Berreman. *Applied Physics Letters*, 25:12, 1974.
- [6] Agnes Buka e Lorenz Kramer, editores. *Pattern Formation in Liquid Crystals*. Partially Ordered Systems. Springer, 1996.
- [7] C. M. Care, I. Halliday, e K. Good. Lattice boltzmann nemato-dynamics. *J. Phys.: Condens. Matter*, 12:L665–L671, 2000.
- [8] J. P. Casquilho. *Estudo das Propriedades Viscoelásticas da Fase Nemática de Polímeros Líquidos Cristalinos por Ressonância Magnética Nuclear*. Tese de Doutorado, FCT/UNL, 1989.

- [9] J. P. Casquilho. Linear analysis of pattern formation in nematics in oblique magnetic fields. *Liquid Crystals*, 26(4):517–524, 1999.
- [10] J. P. Casquilho e J. L. Figueirinhas. Linear analysis of transient pattern evolution in the non-Frédericksz twist geometry. *Liquid Crystals*, 29(1):127–132, 2002.
- [11] J. P. Casquilho, L. N. Gonçalves, e J. L. Figueirinhas. Change of the nature of the multicritical point in magnetically induced splay-twist Fréedericksz transitions. *Physical Review E*, 58(1):626–629, 1998.
- [12] J. P. Casquilho, L. N. Gonçalves, e A. F. Martins. On the influence of the Frank elasticity on the magnetic reorientation of nematic polymers. *Liquid Crystals*, 21(3):651–661, 1996.
- [13] Sivaramakrishna Chandrasekhar. *Liquid Crystals*. Cambridge University Press, 2 edição, 1992.
- [14] P. E. Cladis e S. Torza. Growth of a smectic a from a bent nematic phase and the smectic light valve. *Journal of Applied Physics*, 46(2):584–599, February 1975.
- [15] P. E. Cladis, W. van Saarloos, P. L. Finn, e A. R. Kortan. Dynamics of line defects in nematic liquid crystals. *Physical Review Letters*, 58(3):222–, January 1997.
- [16] Robert Cohen e Mitchell Luskin. Field-induced instabilities in nematic liquid crystals. In Jean-Michel Coen, Jean-Michel Ghidaglia, e Frédéric Hélein, editores, *Nematics, Mathematical and Physical Aspects*, volume 332 da série *NATO ASI Series C: Mathematical and Physical Sciences*, páginas 261–278. Kluwer Academic, 1991.
- [17] Peter J. Collings. *Liquid Crystals, Nature's Delicate Phase of Matter*. Princeton University Press, 1990.
- [18] M. C. Cross e P. C. Hohenberg. Pattern formation outside of equilibrium. *Reviews of Modern Physics*, 65(3):851–1088, 1993.

- [19] Ingolf Dahl e Arnout de Meyere. On higher order variational analysis in one and three dimensions for soft boundaries. *Liquid Crystals*, 18(5):683–692, 1995.
- [20] P. G.. de Gennes e J. Prost. *The Physics of Liquid Crystals*. Oxford University Press, 2 edição, 1993.
- [21] Pierre Giles de Gennes. *Solid State Communications*, 10:753, 1972.
- [22] Colin Denniston. Disclination dynamics in nematic liquid crystals. *Physical Review B*, 54(9):6272–6275, September 1996.
- [23] Colin Denniston, Enzo Orlandini, e J. M. Yeomans. Lattice boltzmann simulations of liquid crystal hydrodynamics. *Physical Review E*, 63:056702–1 – 056702–10, 2001.
- [24] G. Derfel. On the analogy between the field-induced and flow-induced deformations in nematic liquid crystals. *Liquid Crystals*, 24(6):829–834, June 1998.
- [25] H. J. Deuling, M. Gabay, E. Guyon, e P. Pieranski. *Journal de Physique (France)*, 36:689, 1975.
- [26] E. Dubois-Violette e P. Manneville. Flow instabilities in nematics. In Agnes Buka e Lorenz Kramer, editores, *Pattern Formation in Liquid Crystals*, capítulo 4. Springer, 1996.
- [27] C. J. Dunn, D. Ionescu, N. Kunitatsu, G. R. Luckhurst, L. Orian, e A. Polimeno. A novel magnetohydrodynamic experiment: Step-rotation of a nematic subject to a magnetic field. *J. Physical Chemistry B*, 104(47):10989–11000, Nov 2000.
- [28] J. L. Ericksen. *Arch. Rational Mech. Analysis*, 4:231, 1960.
- [29] J. L. Ericksen. *Phys Fluids*, 9:1205, 1966.
- [30] J. L. Ericksen. Liquid crystals with variable degree of orientation. *Arch. Rational Mech. Analysis*, 113:97–120, 1991.

- [31] P. Esnault, J. P. Casquilho, F. Volino, A. F. Martins, e A. Blumstein. Reorientation instabilities and viscoelastic measurements in a main chain thermotropic nematic polymer, optical and NMR studies. *Liquid Crystals*, 7(5):607–628, 1990.
- [32] J. L. Figueirinhas, L. N. Gonçalves, e J. P. Casquilho. Fréedericksz transition thresholds in pretilted nematic slabs. *Physical Review E*, 60(3):2985–2989, 1999.
- [33] F. Fischer. *Z. Naturforsch.*, 31A:302, 1976.
- [34] F. C. Frank. On the theory of liquid crystals. *Discussions of the Faraday Society*, 25:19–28, 1958.
- [35] V. Fréedericksz e V. Zolina. Forces causing the orientation of an anisotropic fluid. *Transactions of the Faraday Society*, 29:919–930, 1933.
- [36] A. J. Galli, Brumage W. H., e G. Cawood. Physics of photography course for fine arts students: The view camera. *American Journal of Physics*, 49(7):641–645, July 1981.
- [37] Walter Gander e U. von Matt. Smoothing filters. In Walter Gander e Jiří Hřebíček, editores, *Solving Problems in Scientific Computing Using MAPLE and MATLAB*, capítulo 9, páginas 135–152. Springer, 3 edição, 1997.
- [38] L. N. Gonçalves. Desenvolvimento de uma aplicação da rnm em reologia de polímeros nemáticos. Tese de Mestrado, FCT/UNL, 1994.
- [39] Rafael C. Gonzalez e Paul Wintz. *Digital Image Processing*. Addison-Wesley, 1987.
- [40] John W. Goodby e George W. Gray. Guide to the nomenclature and classification of liquid crystals. In D. Demus, J. W. Goodby, G. W. Gray, H.-W. Spiess, e V. Vill, editores, *Physical Properties of Liquid Crystals*, capítulo 2, páginas 17–23. Wiley-VCH, 1999.
- [41] C. Gooden, R. Mahmood, D. Brisbin, A. Baldwin, D. L. Johnson, e M. E. Neubert. Simultaneous magnetic-deformation and light-scattering study of bend and twist



- elastic-constant divergence at the nematic-smectic-*a* phase transition. *Physical Review Letters*, 54(10):1035–1038, March 1985.
- [42] I. S. Grant e W. R. Phillips. *Electromagnetism*, capítulo Units. The Manchester Physics Series. John Wiley & Sons Ltd.
- [43] W. Greubel. *Applied Physics Letters*, 25:6, 1974.
- [44] M. Grigutsch, N. Klöpffer, H. Schmiedel, e R. Stannarius. Transient structures in the twist Fréedericksz transition of low-molecular-weight nematic liquid crystals. *Physical Review E*, 49(6):5452–5461, June 1994.
- [45] H. Gruler, U. Dewald, e M. Eberhardt. Nematic liquid crystals formed by living amoeboid cells. *European Journal of Physics B*, 11:187–192, 1999.
- [46] Onnagawa H. e K. Miyashita. *Jpn. J. Appl. Phys.*, 13:1741, 1974.
- [47] W. Helfrich. *Physical Review Letters*, 21:1518, 1968.
- [48] P. V. C. Hough. Methods and means for recognizing complex patterns. Technical report, U. S. Patent 3069645, 1962.
- [49] Kerson Huang. *Statistical Mechanics*. John Wiley & Sons, 2 edição, 1987.
- [50] NP 2626-121. *Norma Portuguesa, Vocabulário Electrotécnico Internacional, Capítulo 121: Electromagnetismo*. Instituto Português da Qualidade, Rua António Girão, 2, PT-2829-513 CAPARICA, 1998.
- [51] John David Jackson. *Classical Electrodynamics*, capítulo Appendix on Units and Dimensions. John Wiley & Sons, Inc., 2 edição, 1975.
- [52] A. J. Karn, S. M. Arakelian, Y. R. Shen, e H. L. Ong. Observation of magnetic-field-induced first-order optical Fréedericksz transition in a nematic film. *Physical Review Letters*, 57(4):448–, July 1986.

- [53] Hans Kelker e Rolf Hatz. *Handbook of Liquid Crystals*, capítulo Liquid Crystals in Living Systems. Verlag Chemie, 1980.
- [54] R. Kemkemer, D. Kling, D. Kaufmann, e H. Gruler. Elastic properties of nematoid arrangements formed by amoeboid cells. *European Journal of Physics E*, 1:215–225, 2000.
- [55] U. D. Kini. On the possibility of generalized Fréedericksz transition in nematics. *Journal de Physique*, 47:693–700, avril 1986.
- [56] Catarina A. R. Leal. *Reologia dos Polímeros Nemáticos - Equações Constitutivas e Natureza da Viscoelasticidade*. Tese de Doutorado, FCT/UNL, 2000.
- [57] F. M. Leslie. *Quart. J. Mech. appl. Math.*, 19:357, 1966.
- [58] F. M. Leslie. *Arch. Rational Mech. Analysis*, 28:265, 1968.
- [59] Franklin Lonberg, Seth Fraden, Alan J. Hurd, e Robert E. Meyer. Field-induced transient periodic structures in nematic liquid crystals: The twist-Fréedericksz transition. *Physical Review Letters*, 52(21):1903–1906, 1984.
- [60] Franklin Lonberg e Robert B. Meyer. New ground state for the splay-freedericksz transition in a polymer nematic liquid crystal. *Physical Review Letters*, 55(7):718–721, August 1985.
- [61] A. F. Martins. Theory of shear rate dependence of viscosity and normal stress differences in nematic LC polymers. In C. Carfagna, editor, *Liquid Crystalline Polymers*, volume 153. Pergamon Press, 1994.
- [62] Assis F. Martins, Alexandre Gomes, Antonino Polimeno, e Laura Orian. Simulations of flow-induced director structures in nematic liquid crystals through lesliericksen equations 2.interpretation of NMR experiments in liquid crystal polymers. *Physical Review E*, 62(2):2301–, August 2000.

- [63] Assis Farinha Martins, P. Esnault, e F. Volino. Measurement of the viscoelastic coefficients of main-chain nematic polymers by an NMR technique. *Physical Review Letters*, 57(14):1745–1748, October 1986.
- [64] Miesowicz. *Nature*, 158:27, 1946.
- [65] J. Nehring. *Physics Letters*, 72A:446, 1979.
- [66] Jürgen Nehring e Alfred Saupe. On the elastic theory of uniaxial liquid crystals. *Journal of Chemical Physics*, 54(1):337–343, 1971.
- [67] C. Oldano. Comment on "new ground state for the splay-Fréedericksz transition in a polymer nematic liquid crystal". *Physical Review Letters*, 56(10):1098, March 1986.
- [68] C. W. Oseen. *Trans. Faraday Soc.*, 29:883, 1933.
- [69] Alexander Ostrowski. *Lições de Cálculo Integral e Diferencial*, volume II. Fundação Calouste Gulbenkian, 3 edição, 1978.
- [70] Ou-Yang, Zhong-Can, Liu Ji-Xing, e Xie Yu-Zhang. *Geometric methods in the elastic theory of membranes in liquid crystal phases*, volume 2 da série *Advanced series on theoretical physical science*. World Scientific, 1999.
- [71] O. Parodi. *Journal de Physique, Paris*, 31:580, 1970.
- [72] E. E. Pashkovsky, W. Stille, e G. Strobl. Periodic pattern formation in side-group polymer nematic solutions at the twist frederiks transition. *Journal de Physique II France*, 5:397–411, March 1995.
- [73] A. Polimeno e A. F. Martins. Two-dimensional hydrodynamical description of a rotating nematic sample in a magnetic sample. *Liquid Crystals*, 25(5):545–552, Nov 1998.

- [74] Antonino Polimeno, Laura Orian, Assis F. Martins, e Alexandre Gomes. Simulations of flow-induced director structures in nematic liquid crystals through leslie-ericksen equations 1.computational methodology in two dimensions. *Physical Review E*, 62(2):2288–, August 2000.
- [75] William H. Press, Saul H. Teukolsky, William T. Vetterling, e Brian P. Flannery. *Numerical Recipes in C*. Cambridge University Press, 2 edição, 1992.
- [76] F. Reinitzer. Zur kenntnis des cholesterins. *Monatshefte*, 9:421, 1888.
- [77] A. Savitzky e J. E. Golay. Smoothing and differentiation of data by simplified least squares procedures. *Analytical Chemistry*, 36:1627–1639, 1964.
- [78] V. Hugo Schmidt. Normal-distortion-mode approach to liquid-crystal elastic energy. *Physical Review Letters*, 64(5):535–538, 1990.
- [79] Elsebeth Schröder. Nematic liquid-crystal director configuration for general elastic coefficients. *Physical Review E*, 62(6):8830–8833, 2000.
- [80] Fernando J. da Silva. *Dicionário da Língua Portuguesa*. Livraria Simões Lopes, 1956.
- [81] G. Srajer, S. Fraden, e R. B. Meyer. Field-induced nonequilibrium periodic structures in nematic liquid crystals: Nonlinear study of the twist Fredericks transition. *Physical Review A*, 39(9):4828–4834, 1989.
- [82] J. Steinier, Y. Termonia, e J. Deltour. Comments on smoothing and differentiation of data by simplified least square procedure. *Analytical Chemistry*, 44:1906–1909, 1972.
- [83] Z. M. Sun e X. Y. Wang. Dynamical characteristics of the Brochard-Leger wall in nematics. *J. Phys. C: Solid State Phys.*, 21(22):L771–L775, August 1988.
- [84] H. R. Trebin. Defects in liquid crystals and cosmology. *Liquid Crystals*, 24(1):127–130, 1998.

- [85] G. Vertogen e W. H. de Jeu. *Thermotropic Liquid Crystals, Fundamentals*, volume 45 da série *Springer Series in Chemical Physics*. Springer-Verlag, 1988.
- [86] Roald K. Wangsness. *Electromagnetic Fields*, capítulo System of Units—A Guide for the Perplexed. John Wiley & Sons.
- [87] H. Zöcher. *Trans. Faraday Soc.*, 29:945, 1933.

# [ÍNDICE

]

acoplamento, 19

agitação térmica, 46, 51

amplitudes angulares, 46, 51

analogias, 5

binário magnético, 11

campo molecular, 11

cisalhamento simples, 19

codificação, 124

comprimento de coerência magnética, 76

densidade média de energia, 8

desta maneira, XIII

detalhes, 5

diagramas de configuração, 48

director, 2

elasticidade de curvatura, 21

elongacional, 20

equações diferenciais, 11, 31, 33, 36, 40, 44, 63, 68

equilíbrio de forças, 73

Euler, 28, 31

flutuações térmicas, 86

força magnética, 28  
Fréedericksz, 24  
  
Gauss, 8  
Gaussiano, 8, 140  
geometrias intermédias, 34  
gradientes do director, 13  
  
harmónicas, 77  
hessiana, 38, 62  
homeotropicamente, 36  
  
integral de superfície, 9  
  
liotrópicas, 1  
  
multiplicador de Lagrange, 11  
  
N-SmA, 5, 40, 44  
nemáticos, 3  
  
ondulações, 53  
  
parede, 82  
parâmetro de ordem, 2  
parâmetro de ordem tensorial, 2  
  
seleccionado, 53  
susceptibilidade magnética, 7, 25, 138, 140  
série de Fourier, 37  
  
termotrópicas, 1, 25  
transformada de Hough, 104, 131  
  
uniaxiais, 3

viscosidades experimentais, 71





Esquemas codificados em METAPOST

Produção de gráficos: **GNUPLOT**

Linguagem de formatação de texto:  $\text{\LaTeX}$ .

Edição patrocinada por

[www.artenumerica.com](http://www.artenumerica.com)