



Universidade Federal Rural de Pernambuco  
Pró-Reitoria de Pesquisa e Pós-Graduação  
Departamento de Física

Programa de Pós-Graduação em Física Aplicada

Retificação em Cristal Líquido Nemático e Esmético sob Influência  
de Defeitos Topológicos

*Jair da Silva Andrade*

Dissertação de Mestrado

Recife - PE

18 de Fevereiro de 2019

Universidade Federal Rural de Pernambuco  
Pró-Reitoria de Pesquisa e Pós-Graduação  
Departamento de Física

*Jair da Silva Andrade*

**Retificação em Cristal Líquido Nemático e Esmético sob Influência  
de Defeitos Topológicos**

Trabalho apresentado ao Programa de Pós-Graduação em Física Aplicada do Departamento de Física da Universidade Federal Rural de Pernambuco como requisito parcial para obtenção do grau de Mestre em Física Aplicada.

**Orientador: Dr. Erms Rodrigues Pereira**

**Recife - PE  
18 de Fevereiro de 2019**

Dados Internacionais de Catalogação na Publicação (CIP)  
Sistema Integrado de Bibliotecas da UFRPE  
Biblioteca Central, Recife-PE, Brasil

A553r Andrade, Jair da Silva  
Retificação em cristal líquido nemático e esmétrico sob  
influência de defeitos topológicos / Jair da Silva Andrade. – 2019.  
69 f.: il.

Orientador: Erms Rodrigues Pereira.  
Dissertação (Mestrado) - Universidade Federal Rural de  
Pernambuco, Programa de Pós-Graduação em Física Aplicada,  
Recife, BR-PE, 2019.  
Inclui referências.

1. Física 2. Matéria Condensada 3. Cristais líquidos  
I. Pereira, Erms Rodrigues, orient. II. Título

CDD 621

UNIVERSIDADE FEDERAL RURAL DE PERNAMBUCO  
PRÓ-REITORIA DE PESQUISA E PÓS-GRADUAÇÃO  
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA APLICADA

—

*Jair da Silva Andrade*

Dissertação julgada adequada para obtenção do título de mestre em Física, defendida e aprovada por unanimidade em 18/02/2019 pela Comissão Examinadora.

Orientador:

---

Prof. Dr. Erms Rodrigues Pereira  
SEDE - UFRPE

Banca Examinadora:

---

Dr. Antônio de Pádua Santos  
SEDE - UFRPE

---

Dr. Marcene Isidorio de Sena Junior  
POLI - UPE



*"Uma das funções sociais da ciência é a de libertar as pessoas das superstições."*

*(Stevan Weinberg)*

Dedico esta, bem como todas as minhas demais conquistas, a todos os meus amigos e familiares.

# Agradecimentos

Agradeço imensamente à minha família pelo apoio e confiança que sempre me deram. Minha mãe Ozeni, junto ao meu pai José Arimatéia, souberam me educar e incentivar a seguir um caminho. Meu irmão Marcelo Fagner pelo auxílio em momentos difíceis. E a minha amada Thaysa Lima, que me ajudou e me manteve calmo nos momentos mais difíceis.

Agradeço imensamente ao meu orientador Prof. Dr. Erms Rodrigues Pereira, que de forma distinta e vital foi de essencial contribuição para a minha formação como pesquisador. Também um grande agradecimento aos professores Prof. Dr. Fernando Jorge Sampaio Moraes, Prof. Dr. Antônio de Pádua e Prof. Dr. Anderson Luiz da Rocha e Barbosa pelas grandes contribuições científicas e acadêmicas que pude aprender como aluno. Ao grande Antógenes Neto pelos auxílios como colega e secretário. E aos demais professores do departamento que contribuíram de alguma forma durante minha estadia na instituição.

Aos amigos que conquistei nessa caminhada, meu irmãos de batalha Marcus Lima, Allan Muniz e Jessé Medeiros. E aos demais amigos e colegas que compartilhamos momentos de descontração de pura Física, Pipinho (Felipe), Júlio, Cachorrão (Helder), Ayron, Filipe, Geninho (Eugênio), Selton, Miguel e Alexandre. Também um agradecimento aos conterrâneos Djardiel, Marconi, Josival, Ygor e Júnior (Nelson). Por fim, meus irmãos de orientação, Lidiane, Vinícius (Pagodinho), Eduardo, Wallysson e Sílvio. Entre outros que contribuíram com essa jornada.

Agradeço também a CAPES pelo suporte financeiro.

# Resumo

Atualmente, o estudo de metamateriais microscópicos e nanoscópicos para o desenvolvimento de dispositivos tornou-se um tema importante. A detecção e o tratamento de sinais ópticos e térmicos são cruciais para várias aplicações. Entretanto, alguns dos materiais utilizados (por exemplo, nanotubos de carbono e estruturas de grafeno) requerem um alto custo financeiro, além de supercomputadores, para o uso de técnicas complexas. Enquanto que, alguns materiais com um custo mais baixo, apresentam resultados equiparáveis. Além disso, garantem uma melhoria sustentável no ponto de vista energético e de manufatura. Neste trabalho, nós mostramos dois dispositivos, o primeiro retifica simultaneamente luz e calor, enquanto o segundo retifica apenas calor. O retificador multifísico consiste de um tubo capilar de cristal líquido nemático 5CB com uma desclinação radial em escape (um defeito com assimetria por inversão translacional ao longo do eixo que surge espontaneamente em cavidades cilíndricas). Usando as propriedades do 5CB, nós obtemos numericamente retificações térmicas e ópticas, respectivamente, 3,5% e 120%, comparável com diodos térmicos de nanotubo de carbono e diodos ópticos baseados em cristais fotônicos. Para o dispositivo que retifica apenas calor, foi usada uma deslocação em aresta em um cristal líquido esmétrico. Através das propriedades geométricas da deslocação, obtemos uma retificação em torno de 82%. Nós acreditamos que os diodos propostos podem contribuir na economia de material (multifísico), miniaturizar sistemas complexos e desenvolver novos dispositivos estruturados.

**Palavras-chave:** Cristal líquido nemático, Desclinação radial em escape, Cristal líquido esmétrico, Deslocação em aresta, Efeito de retificação.

# Abstract

Currently, the study of microscopic and nanoscopic metamaterials for the development of devices has become an important topic. The detection and treatment of signals, as optical and thermal ones, are crucial for many relevant applications. However, some of the materials used (e.g. carbon nanotubes and graphene structures) require a high financial cost, in addition to supercomputers, for the use of complex techniques. While some materials with a lower cost have comparable results. In addition to a sustainable improvement in the energy and manufacturing point of view. In this work, we show two devices, the first rectifies simultaneously light and heat, while the second one rectifies only heat. The multiphysics rectifier consists of a capillary tube keeping a nematic liquid crystal 5CB that holds an escaped radial disclination (an defect with translational inversion asymmetry along the axis that spontaneously arises in cylindrical cavities). Using the properties of the 5CB, we numerically measured thermal and optical rectifications of, respectively, 3.5% and 120%, comparable to carbon nanotube thermal diodes and optical diodes made of photonic crystal. For the device that rectifies only heat, we used an edge dislocation in smectic liquid crystal. Because of the geometric properties of the dislocation, we measured thermal rectification around 82%. We believe the presented diodes can contribute to save materials (multiphysics), miniaturize complex systems and develop new structured devices.

**Keywords:** Nematic liquid crystal, Escaped radial disclination, Smectic liquid crystal, Edge dislocation, Rectification effect.

# Sumário

<b>1</b>	<b>Introdução</b>	<b>1</b>
1.1	Motivação . . . . .	1
1.2	Problemas Propostos . . . . .	2
1.3	Objetivos . . . . .	3
1.3.1	Objetivos Gerais . . . . .	3
1.3.2	Objetivos Específicos . . . . .	3
1.4	Estrutura do Trabalho . . . . .	3
<b>2</b>	<b>Cristais Líquidos</b>	<b>4</b>
2.1	Contexto Histórico . . . . .	4
2.2	Definição . . . . .	6
2.3	Classificação . . . . .	6
2.3.1	Termotrópicos . . . . .	6
2.3.2	Liotrópicos . . . . .	7
2.3.3	Poliméricos . . . . .	7
2.4	Versor diretor . . . . .	9
2.5	Mesofases . . . . .	9
2.5.1	Nemática . . . . .	10
2.5.2	Esmética . . . . .	12
2.6	Aplicações . . . . .	13

<b>3</b>	<b>Defeitos Topológicos em Cristais Líquidos</b>	<b>16</b>
3.1	Formação de Defeitos . . . . .	16
3.2	Desclinação . . . . .	18
3.2.1	Desclinação Radial em Escape . . . . .	20
3.3	Deslocação em Cristal Líquido . . . . .	22
3.3.1	Deslocação em Aresta em CL Esmético . . . . .	23
<b>4</b>	<b>As Propriedades Multifísicas dos Cristais Líquidos</b>	<b>25</b>
4.1	Propagação Anisotrópica . . . . .	25
4.2	Propriedades Tensoriais do CLN com uma Desclinação Radial em Escape . . . . .	26
4.3	Tensor Condutividade Térmica dos CLSm com Deslocação em Aresta . . . . .	27
<b>5</b>	<b>Diodo Multifísico de Cristal Líquido Nemático</b>	<b>29</b>
5.1	Influência da forma, do calor e do ângulo de ancoramento . . . . .	31
<b>6</b>	<b>Diodo Térmico de Cristal Líquido Esmético</b>	<b>36</b>
6.1	Verificação da independência do fluxo de calor e da temperatura inicial . . . . .	40
<b>7</b>	<b>Conclusões</b>	<b>42</b>
	<b>Referências</b>	<b>54</b>

# Lista de Figuras

2.1	Representação das moléculas calamíticas (esquerda) e dicóticas (direita). Figura adaptada da fonte: Maurice Kleman and Oleg D Laverntovich. Soft matter physics: an introduction. Springer Science & Business Media, 2007. . .	7
2.2	Representação de uma molécula anfipática de fosfolipídios: (a) fosfatidilserina, (b) fosfatidiletanolamina e (c) fosfatidilcolina (lecitina). Figura adaptada da fonte: Maurice Kleman and Oleg D Laverntovich. Soft matter physics: an introduction. Springer Science & Business Media, 2007. . . . .	8
2.3	Esquema geral de um cristal líquido polimérico de (a) cadeia principal e (b) cadeia lateral. Fonte: Maurice Kleman and Oleg D Laverntovich. Soft matter physics: an introduction. Springer Science & Business Media, 2007. . . . .	8
2.4	Representação do versor de diretor para um aglomerado de moléculas: a) calamíticas e b) discóticas. Figura adaptada da fonte: M. Cardoso. Contribuição para o estudo da fase nemática biaxial em dendrímeros líquido-cristalinos termotrópicos, Dissertação de Mestrado, Instituto Superior Técnico, 2007. . . .	9
2.5	Representação do estado: a) sólido-cristalino, b) líquido-cristalino e c) líquido-isotrópico. Disponível em: <a href="https://bit.ly/2RYauE0">https://bit.ly/2RYauE0</a> . Acesso em: 10 de janeiro de 2019. . . . .	10



2.6	Representação da mesofase nemática uniaxial com moléculas (a) calamíticas e (b) discóticas, onde o versor $\vec{a}$ é a orientação de uma molécula individual; e de uma (c) nemática biaxial, onde $\vec{n}$ é o versor diretor, sendo $\vec{l}$ e $\vec{m}$ chamados de co-diretores. Figura adaptada da fonte: Maurice Kleman and Oleg D Laverntovich. <i>Soft matter physics: an introduction</i> . Springer Science & Business Media, 2007. . . . .	11
2.7	Ancoramento das moléculas entre duas superfícies planas: (a) planar, (b) inclinado e (c) homeotrópico. Figura adaptada da fonte: Djair Ferreira Almeida Melo. <i>Proposta de um diodo térmico feito de cristal líquido nemático</i> , Dissertação de Mestrado, Universidade Federal de Alagoas, 2015. . . . .	11
2.8	Representação da fase (a) esméctica A (SmA) com modulação periódica de densidade, e da fase (b) esméctica C (SmC), onde o versor $\vec{a}$ é a orientação de uma molécula individual, e o versor $\vec{n}$ é o versor diretor. Figura adaptada da fonte: Maurice Kleman and Oleg D Laverntovich. <i>Soft matter physics: an introduction</i> . Springer Science & Business Media, 2007. . . . .	13
2.9	(a) Termômetro digital com mostrador de cristal líquido. Disponível em: <a href="https://bit.ly/2RQi0jn">https://bit.ly/2RQi0jn</a> . Acesso em: 07 de janeiro de 2019. (b) Televisor digital de cristal líquido e (c) janelas ópticas de CL. Figura adaptada da fonte: Renato Ribeiro Guimarães. <i>Investigação da dinâmica de defeitos topológicos em sistema líquido-cristalino</i> , Dissertação de Mestrado, Universidade Estadual de Maringá, 2012. . . . .	14
2.10	Mapeador térmico de cristal líquido colestérico. Fonte: Fernando Ely, MHMO Hamanaka, and Alaide Pellegrini Mammana. <i>Cristais líquidos colestéricos: a quiralidade revela as suas cores</i> . <i>Química Nova</i> , 30(7):1776, 2007. . . . .	14
2.11	(a) Representação de uma bicamada lipídica pura e (b) uma membrana: constituída com uma bicamada lipídica. Disponível em: <a href="https://bit.ly/2QVxqOG">https://bit.ly/2QVxqOG</a> . Acesso em: 10 de janeiro de 2019. . . . .	15

3.1	Esquemática da formação de defeitos, começando pela (a) fase isotrópica que (b) após sofrer uma quebra de simetria através de uma transição de fase, (c) cria defeitos no encontro de regiões de ordenamento distinto. (d) Temos então os defeitos já formados. Figura adaptada da fonte: Renato Ribeiro Guimarães. Investigação da dinâmica de defeitos topológicos em sistema líquido-cristalino, Dissertação de Mestrado, Universidade Estadual de Maringá, 2012.	17
3.2	Linhas de desclinação em um cristal líquido nemática visto através de um microscópio polarizador. Figura adaptada da fonte: Maurice Kleman and Oleg D Laverntovich. Soft matter physics: an introduction. Springer Science & Business Media, 2007. . . . .	18
3.3	As três possíveis deformações do diretor de um cristal líquido: (a) splay, (b) twist, e (c) bend. Figura adaptada da fonte: Deng-Ke Yang. Fundamentals of liquid crystal devices. John Wiley & Sons, 2014. . . . .	19
3.4	Representações das possíveis configurações do diretor ao redor de uma desclinação. Fonte: Djair Ferreira Almeida Melo. Proposta de um diodo térmico feito de cristal líquido nemático, Dissertação de Mestrado, Universidade Federal de Alagoas, 2015. . . . .	21
3.5	Representação da desclinação radial em escape: (a) em duas dimensões e (b) em três dimensões (metade do cilindro capilar). Figura adaptada da fonte: Djair Ferreira Almeida Melo. Proposta de um diodo térmico feito de cristal líquido nemático, Dissertação de Mestrado, Universidade Federal de Alagoas, 2015. . . . .	22
3.6	Representação da (a) deslocação em aresta e da (b) deslocação em parafuso. Figura adaptada da fonte: Fonte: Maurice Kleman and Oleg D Laverntovich. Soft matter physics: an introduction. Springer Science & Business Media, 2007.	22
3.7	Representação do par de desclinações criando uma deslocação em aresta. Figura adaptada da fonte: Fernando Moraes. Geodesics around a dislocation. Physics Letters A, 214(3-4): 189-192, 1996. . . . .	23

5.1	Representação do diodo multifísico. Visão axial do tubo capilar confinando a desclinação radial em escape na direção $-\hat{z}$ . Para os resultados de Melo [1], a direção direta térmica do diodo é na direção da desclinação radial em escape, enquanto em nosso trabalho a direção direta óptica é na direção $+\hat{z}$ . . . . .	30
5.2	Intensidade do campo elétrico, com um fluxo de calor na direção $-\hat{z}$ , quando a luz viagem na direção $-\hat{z}$ (esquerda) e na direção $+\hat{z}$ (direita). Os parâmetros usados foram a magnitude da radiação incidente de $1 V/m$ , fluxo de calor $Q = 5 kW/m^2$ , raio $R = 22 \mu m$ , comprimento $H = 30 \mu m$ , comprimento de onda $\lambda = 50 \mu m$ e ângulo de ancoramento $\beta_0 = 90^\circ$ . . . . .	31
5.3	Retificação óptica em função do comprimento do diodo com o fluxo de calor na direção $-\hat{z}$ . Os parâmetros utilizados foram magnitude da radiação incidente de $1 V/m$ , fluxo de calor de $Q = 5 kW/m^2$ na direção $-\hat{z}$ , raio de $R = 30 \mu m$ , ângulo de ancoramento de $\beta_0 = 90^\circ$ e comprimento de onda de $\lambda = 50 \mu m$ . . . . .	32
5.4	Retificação óptica em função do raio do diodo com o fluxo de calor na direção $-\hat{z}$ . Os parâmetros usados foram fluxo de calor de $Q = 5 kW/m^2$ , magnitude da radiação incidida $1 V/m$ , comprimento $H = 30 \mu m$ , ângulo de ancoramento $\beta_0 = 90^\circ$ e comprimento de onda de $\lambda = 50 \mu m$ . . . . .	33
5.5	Retificação óptica em função da magnitude do fluxo de calor nas direções $-\hat{z}$ (preto) e $+\hat{z}$ (vermelho). Os parâmetros utilizados foram magnitude da radiação incidente de $1 V/m$ , raio $R = 30 \mu m$ , comprimento $H = 40 \mu m$ , comprimento de onda $\lambda = 50 \mu m$ e ângulo de ancoramento $\beta_0 = 90^\circ$ . . . . .	34
5.6	Retificação óptica em função do ângulo de ancoramento. Os parâmetros usados foram: magnitude da radiação incidida $1 V/m$ , comprimento $H = 50 \mu m$ , raio $R = 60 \mu m$ , comprimento de onda $\lambda = 50 \mu m$ e fluxo de calor de $Q = 5 kW/m^2$ na direção $-\hat{z}$ . . . . .	35
6.1	Representação do diodo térmico. Visão lateral das camadas esméticas com a deslocação em aresta com a direção direta do diodo na direção $+\hat{x}$ . . . . .	37

6.2	Retificação térmica na direção $+\hat{x}$ em função da magnitude do vetor de Burger. Os parâmetros usados foram: temperatura inicial de $T = 296$ K, fluxo de calor de $Q = 5$ kW/m <sup>2</sup> e comprimento de $L = 100$ $\mu$ m. . . . .	38
6.3	Retificação térmica em função da temperatura inicial. Os parâmetros usados foram magnitude do vetor de Burger $b = 10$ $\mu$ m (vermelho), $b = 15$ $\mu$ m (laranja) e $b = 20$ $\mu$ m (amarelo), fluxo de calor de $Q = 5$ kW/m <sup>2</sup> e comprimento de $L = 100$ $\mu$ m. . . . .	39
6.4	Mapeamento térmico de um cristal líquido esmétrico com efeito da deslocação em aresta; (a) fluxo de calor na direção $-\hat{x}$ e (b) fluxo de calor na direção $+\hat{x}$ . Os parâmetros usados foram fluxo de calor $Q = 5$ kW/m <sup>2</sup> , magnitude do vetor de Burger $b = 10$ $\mu$ m, temperatura inicial $T = 296$ K e comprimento $L = 100$ $\mu$ m. . . . .	40
6.5	Mapeamento térmico de um cristal líquido esmétrico com efeito da deslocação em aresta; fluxo de calor na direção $+\hat{x}$ (esquerda) e fluxo de calor na direção $-\hat{x}$ (direita). Os parâmetros usados foram fluxo de calor $Q = 5$ kW/m <sup>2</sup> , ângulo das desclinações $m = 6,28$ rad, temperatura inicial $T = 296$ K e comprimento $L = 100$ $\mu$ m. . . . .	41

# Capítulo 1

## Introdução

Na segunda metade do século XIX, foi descoberta uma fase intermediária da matéria, onde determinados materiais compartilham propriedades de líquidos isotrópicos e de cristais. Essa nova fase possui propriedades ópticas de sólidos cristalinos, mesmo tendo aspecto de um fluido isotrópico. Conhecido atualmente como cristais líquidos, esses materiais possuem várias mesofases, que após uma transição de fase entre elas, eles tendem a se reorganizar no estado de mínima energia. Geralmente, nessa reorganização surgem defeitos topológicos, que aparecem em materiais que tem um certo ordenamento, e esses defeitos são regiões onde o sistema não possui uma ordem bem definida [2, 3].

Os estudos de defeitos topológicos em diferentes sistemas de matéria condensada têm gerado diversos trabalhos [4–9]. E em várias investigações teóricas [10] e experimentais [11, 12] em cristais líquidos, vêm buscando explicar o processo do ordenamento após uma transição de fase com quebra de simetria [13–18].

### 1.1 Motivação

A manipulação de diferentes formas de energia, como luz e calor, é de grande importância nas áreas tecnológicas e econômica. Um caminho promissor nessa manipulação é o uso de micro e nanoestruturas de metamateriais [19, 20], que possuem fenômenos físicos que podem ser descritos por um processo óptico [21] ou um processo termodinâmico [22]. Com esses

materiais é possível projetar e criar vários dispositivos como: diodos térmicos e ópticos [23, 24], transistores térmicos e ópticos [25–27], memória térmica e óptica [20, 28].

Usando diferentes mecanismos, foram propostos dispositivos que retificam luz ou calor. Para a retificação da luz (calor), a onda eletromagnética (fluxo de calor) viaja facilmente em um sentido, e com dificuldade no sentido oposto. Assim, foram criados vários dispositivos para obter tal fenômeno: diodo óptico usando estruturas eletromagnéticas assimétricas como guias de onda [29–31]; diodo óptico feito com a união experimental de dois cristais fotônicos de silício diferentes [32]; retificador de luz usando efeito Doppler assimétrico em cristal fotônico [24]; diodos térmicos utilizando elementos assimétricos e propriedades térmicas não-lineares [23, 33–37]; diodo térmico desenvolvido através dispersores de calor assimétricos [37]; diodo térmico usando o defeito topológico desclinação radial em escape presa em um tubo capilar [1]. No entanto, todas essas proposições são monofísicas, isto é, eles lidam apenas com calor ou radiação eletromagnética.

## 1.2 Problemas Propostos

Como visto anteriormente, vários trabalhos foram feitos buscando provocar o efeito de retificação térmica ou óptica. Em nossos estudos, analisamos a possibilidade de um dispositivo capaz de retificar luz e calor simultaneamente. Para isto, usamos um defeito topológico conhecido como desclinação radial em escape confinado em um tubo cilíndrico de cristal líquido 5CB, onde tentamos descrever suas propriedades térmicas e ópticas numericamente, utilizando o software COMSOL Multiphysics.

Seguindo a mesma linha de estudo, decidimos obter as propriedades térmicas de um cristal líquido esmético sob a influência de um defeito chamado deslocação em aresta. Dessa maneira, usamos a métrica que descreve a geometria da deslocação para simular o tensor condutividade térmica e verificar se a sua assimetria poderia provocar o efeito de retificação térmica.

## 1.3 Objetivos

### 1.3.1 Objetivos Gerais

Simular computacionalmente um diodo multifísico a base de cristal líquido nemático, visando o efeito de retificação térmica e óptica. Idealizar um dispositivo de cristal líquido esmético capaz de retificar calor.

### 1.3.2 Objetivos Específicos

- Utilizar parâmetros controláveis; comprimento, raio, ângulo de ancoramento, fluxo de calor, intensidade do campo elétrico, magnitude do vetor de Burger. Úteis nas simulações dos dispositivos;
- Estudar a relação entre as retificações óptica e térmica e os parâmetros controláveis;
- Buscar as maiores retificações variando os parâmetros.

## 1.4 Estrutura do Trabalho

Esta dissertação está estruturada em 7 capítulos. No segundo capítulo, estão expostos os fundamentos necessários sobre cristais líquidos, desde a contextualização histórica, definição, classificação, até as mesofases usadas no trabalho e algumas aplicações. Subsequentemente, o capítulo 3 mostra a formação de defeitos topológicos em meio líquido-cristalino, e como são definidos os defeitos do tipo desclinação: desclinação radial em escape, e do tipo deslocação: deslocação em aresta. No capítulo 4, são apresentadas as propriedades multifísicas dos cristais líquidos, onde temos a propagação anisotrópica e os tensores: geométrico da desclinação radial em escape; condutividade térmica da deslocação em aresta. Posteriormente, temos a proposição do dispositivo retificador de luz e calor, diodo multifísico, onde são mostrados os resultados obtidos e a idealização do aparelho. Esta proposta nos rendeu o trabalho mostrado na Referência [38]. No sexto capítulo, os resultados para o efeito da deslocação em aresta nas propriedades térmicas esméticas são expostos na concepção de um diodo térmico. Por fim, no capítulo 7, temos as conclusões do trabalho.

# Capítulo 2

## Cristais Líquidos

Neste capítulo, apresentaremos os conceitos fundamentais dos cristais líquidos, onde iniciaremos pelo contexto histórico e definição, em seguida mostraremos as classificações, as mesofases e, por fim, as principais aplicações.

### 2.1 Contexto Histórico

Em 1888, no Instituto de Fisiologia de Plantas da Universidade de Praga, o botânico Friedrich Reinitzer observou que dois materiais, benzoato e acetato de colesterila, presente nas plantas, tinham dois pontos de fusão diferentes [39]. Sem saber que se tratavam de estruturas líquido-cristalinas, mais tarde essa observação lhe rendeu o mérito da descoberta dos cristais líquidos. Isso não tira o fato de que mesofases líquido-cristalinas possam ter sido observadas anteriormente [40–43], a diferença é que faltou uma percepção de que poderia se tratar de um novo comportamento da matéria.

Sem ser capaz de explicar o fenômeno, Reinitzer procurou o físico alemão Otto Lehmann, especialista em óptica de cristais. Lehmann, ao analisar as amostras enviadas por Reinitzer, chamou algumas de cristais que fluem (*Fließendre Krystalle*) ou cristais líquidos viscosos (*Schlening flüssige Krystalle*) e outras de cristais líquidos que forma gotas (*krystalline flüssigkeit* ou *tropfbar flüssige krystalline*) [44]. Em 1900, ele chamou esse novo estado da matéria de cristal líquido, mostrando que era uma fase entre a fase cristalina e a isotrópica,



apresentando propriedades de ambas [45].

Como vimos, o primeiro relato sobre cristal líquido ocorreu em 1854, com o médico alemão Rudolf Virchow. Ele publicou um artigo sobre a mielina, uma camada que protege os neurônios, que tem características parecidas com as de um cristal líquido, hoje conhecido como liotrópico. Essa substância só foi explicada mais tarde, no século XX, McBain [46] disse que seria uma micela como um aglomerado de moléculas tensoativas<sup>1</sup>. Depois, Debye, em 1949, reconheceu a existência de um amontoado micelar crítico [47], assim como os grupos de Ekwall, Luzzati e Winsor [48–50] estabeleceram as principais características da estrutura das mesofases liotrópicas.

O primeiro cristal líquido sintetizado artificialmente foi o termotrópico *para-azoxi-anisol* (PAA), feito esse dado pelos químicos alemães Gatterman e Ritschke, em 1890. Hoje, uma variedade de cristais líquidos são sintetizados, como por exemplo o 5CB<sup>2</sup>. Também existem uma série de *n*CBs que foram descobertos pelo escocês George W. Gray, na Inglaterra, que também foi um dos primeiros a pesquisar sobre os cristais líquidos poliméricos [51].

No início do século XX, o cristalógrafo francês George Friedel foi o primeiro a explicar os efeitos de orientação sob a influência de um campo elétrico, e a presença de defeitos em cristais líquidos. Friedel propôs uma classificação baseada no ordenamento das moléculas [52].

No início da Segunda Guerra Mundial, o sueco Carl Oseen [53] e o tcheco Zöcher [54] construíram formalismos matemáticos para estudar as mesofases. Dessa forma, ao fim da guerra, muitos cientistas achavam que já sabiam todas as principais características e propriedades líquido-cristalinas. Até que em meados de 1950, Brown, Christakoff, e de Gray e Frank, desenvolveram trabalhos que trouxeram o interesse dos pesquisadores para os cristais líquidos. Frank, e depois Leslie e Ericksen formularam teorias no contínuo para sistemas dinâmicos e estáticos. Em 1968, um grupo da *Radio Corporation of America* (RCA) construíram o primeiro *display* de cristal líquido.

Em 1967, Lawson e Flautt, estudaram uma maneira de utilizar conceitos parecidos tanto

---

<sup>1</sup>Tensoativa é uma substância que diminui a tensão superficial ou influencia a superfície de contato entre líquidos.

<sup>2</sup>O 4-ciano-4'-pentilbifenila, ou 5CG, é um cristal líquido nemático

em cristais líquidos liotrópicos quanto em cristais líquidos termotrópicos, assim podendo analisar diferentes tipos de líquido-cristalino [55]. O físico teórico francês Pierre-Gilles de Gennes, ainda nos anos 60, mudou sua área de pesquisa para cristais líquidos, onde encontrou analogias com sua linha de pesquisa anterior, supercondutores e materiais magnéticos, o que lhe rendeu o prêmio Nobel de Física de 1991. Neste mesmo ano, Ericksen formulou uma Teoria do Contínuo para nemáticos, podendo descrever melhor os defeitos.

Agora que sabemos um pouco de como tudo começou, vamos definir melhor os cristais líquidos.

## 2.2 Definição

Os materiais conhecidos como cristais líquidos são uma classe de materiais que podem se apresentar em estados da matéria entre o estado líquido-isotrópico e o sólido-cristalino. Eles são fluidos parcialmente ordenados e anisotrópicos. Os conjuntos de moléculas dos cristais líquidos possuem ordem orientacional de longo alcance, assim como, posicional de pequeno alcance. Isto é, fluem como um líquido, mas apresentam um ordenamento característico dos sólidos. Eles são categorizados como "matéria-mole" (*soft-matter*), onde é necessário pouca energia para provocar uma mudança macroscópica.

## 2.3 Classificação

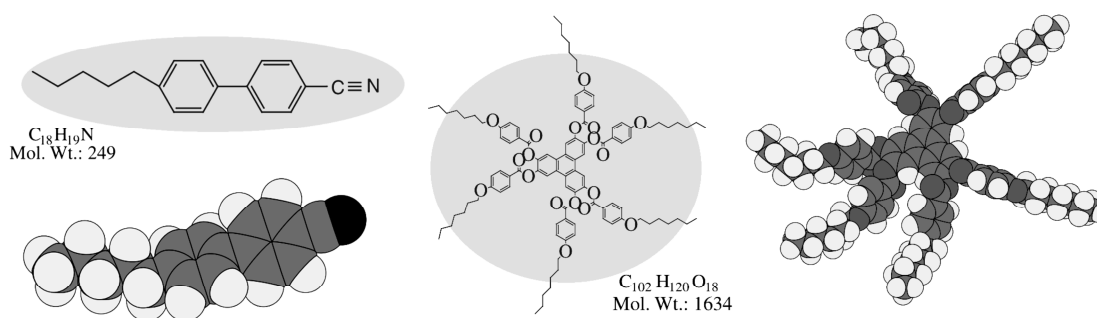
Os cristais líquidos são classificados em 3 tipos, termotrópicos, liotrópicos e poliméricos. Essa classificação é dada de acordo com a sua composição. A seguir mostraremos as principais características de cada um deles:

### 2.3.1 Termotrópicos

Os cristais líquidos termotrópicos possuem moléculas em forma de bastão (mais comum), disco, arcos, entre outras. As mais comuns, bastão e disco, também são conhecidas como calamíticas e discóticas, respectivamente, como podemos ver na Figura 2.1. Além de apresentar

anisotropia, não há criação de aglomerados moleculares. A temperatura dita o ordenamento local das estruturas, onde variando-a pode provocar transições de fase do material [56].

Figura 2.1: Representação das moléculas calamíticas (esquerda) e dicóticas (direita). Figura adaptada da fonte: Maurice Kleman and Oleg D Lavrentovich. *Soft matter physics: an introduction*. Springer Science & Business Media, 2007.



### 2.3.2 Liotrópicos

Os cristais líquidos liotrópicos são compostos de moléculas anfipática (moléculas que possuem uma região hidrofílica (solúvel na água), e uma região hidrofóbica (insolúvel na água)), como mostrado na Figura 2.2 e solventes que dependendo das condições físicas podem apresentar formação de aglomerados - superestruturas - organizados espacialmente [56, 57].

### 2.3.3 Poliméricos

Esse tipo de cristal líquido é formado por cadeias poliméricas, onde a elasticidade é dependente dos vínculos na estrutura. Esses vínculos são determinados pelos componentes químicos dos monômeros<sup>3</sup>. Desse modo, podem existir polímeros muito flexíveis e outros rígidos [58]. Polímeros de cadeia rígida não apresentam mesofases, diferentemente dos termotrópicos, onde a rigidez favorece interações intermoleculares anisotrópicas, pois, à medida que a temperatura aumenta, a estrutura polimérica começa a sofrer rupturas. Os dois principais tipos de cristais líquidos poliméricos são: polímero de cadeia principal (moléculas

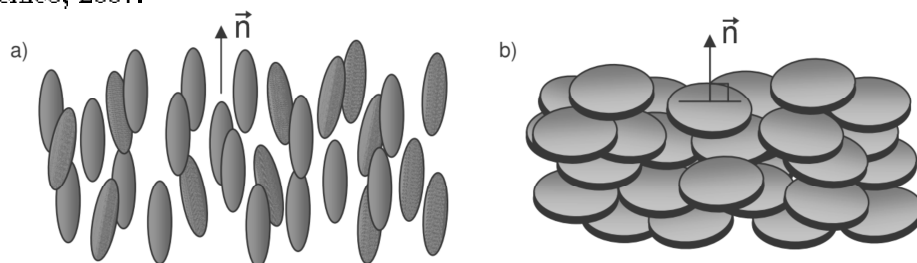
<sup>3</sup>"Mero" é uma unidade orgânica que se repete sucessivamente para formar um polímero (muitos meros). Assim, um mero: monômero.



## 2.4 Versor diretor

Antes de apresentar o próximo tópico sobre as mesofases dos cristais líquidos, vamos caracterizar o conceito de versor diretor,  $\vec{n}$ , conceito este totalmente relacionado com a ordem orientacional de longo alcance. O diretor indica a direção preferencial de alinhamento das moléculas líquido-cristalinas. Ele é comumente representado no centro de massa dos conjuntos moleculares, como mostrado na Figura 2.4.

Figura 2.4: Representação do versor de diretor para um aglomerado de moléculas: a) calamíticas e b) discóticas. Figura adaptada da fonte: M. Cardoso. Contribuição para o estudo da fase nemática biaxial em dendrímeros líquido-cristalinos termotrópicos, Dissertação de Mestrado, Instituto Superior Técnico, 2007.

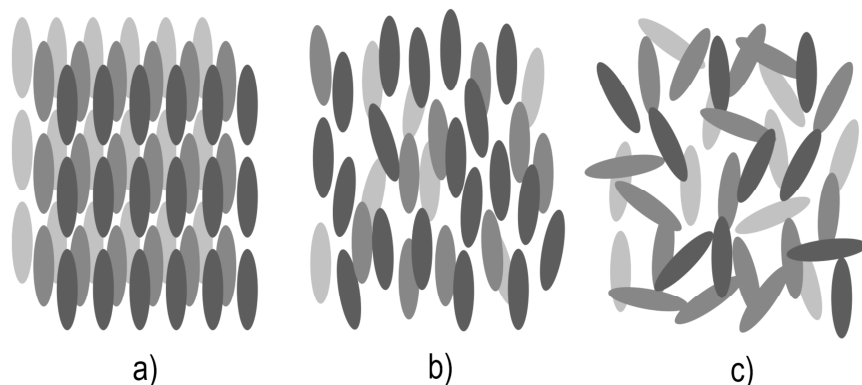


## 2.5 Mesofases

Os cristais líquidos podem apresentar diferentes estados conhecidos como mesofases. Essas mesofases podem apresentar propriedades cristalinas e isotrópicas, de acordo com a mesofase. Um material líquido-cristalino (Figura 2.5-b) pode criar um estado sólido-cristalino (Figura 2.5-a), desde que o sistema apresente ordem posicional e orientacional de longo alcance. Todavia, o material também pode formar o estado líquido-isotrópico (Figura 2.5-c), ou seja, não há nenhum dos tipos de ordem.

As mesofases são caracterizadas pela ordem orientacional e posicional de longo alcance, dependendo da temperatura. Elas são, geralmente, classificadas como nemática ( $N$ ), esméctica ( $Sm$ ), colestérica ( $Ch$ ) e lamelar. Agora vamos descrever melhor cada as duas primeiras, utilizadas em nosso trabalho.

Figura 2.5: Representação do estado: a) sólido-cristalino, b) líquido-cristalino e c) líquido-isotrópico. Disponível em: <https://bit.ly/2RYauE0>. Acesso em: 10 de janeiro de 2019.



### 2.5.1 Nemática

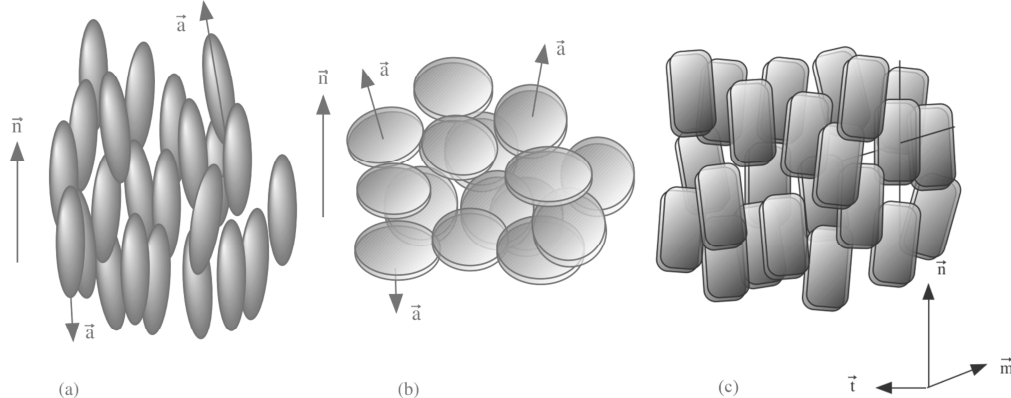
A mesofase nemática possui menos ordem e mais simetria do que as demais. Para obtê-la, geralmente, é diminuída a temperatura de um material na fase isotrópica, provocando uma transição de fase de primeira ordem. Na mesofase nemática as moléculas tendem a ficar paralelas localmente em uma direção descrita pelo vetor diretor. Ou seja, existe uma ordem de orientação de longo alcance em relação ao eixo molecular. E ela ainda pode ser descrita opticamente como uniaxial, sendo moléculas calamíticas ou discóticas (Figura 2.6-a) e Figura 2.6-b)), e também biaxial, como mostrado na Figura 2.6-c) [59].

Em 1976, um grupo canadense fez a primeira classificação de nemáticos uniaxiais liotrópicos. Eles usaram ressonância magnética nuclear e valores de birrefringência óptica com dependência do sinal anisotrópico da susceptibilidade diamagnética, classificando-os assim como nemáticas liotrópicos do tipo I e do tipo II. Os do tipo I têm anisotropia óptica negativa, ou seja, ao incidir um campo magnético intenso, o vetor diretor se alinha paralelamente a ele. Já na tipo II, a anisotropia óptica é positiva, nesse caso, o diretor se alinha perpendicular ao campo magnético [60, 61].

#### Ancoramento na mesofase nemática

Os cristais líquidos estão sujeitos a efeitos de superfície, que depende de cada mesofase. Os CLs nemáticos são muito utilizados tecnologicamente, como em mostradores digitais,

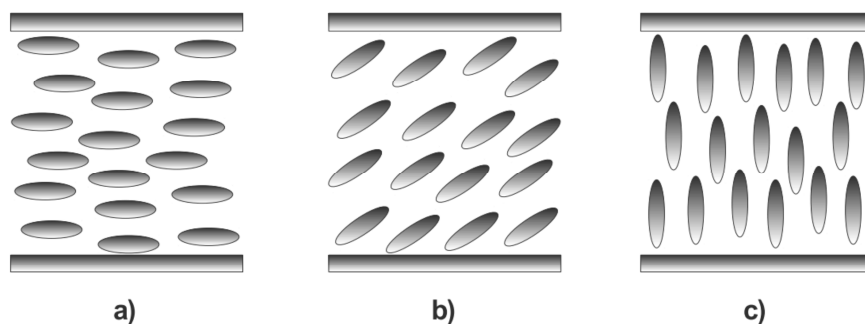
Figura 2.6: Representação da mesofase nemática uniaxial com moléculas (a) calamíticas e (b) discóticas, onde o versor  $\vec{a}$  é a orientação de uma molécula individual; e de uma (c) nemática biaxial, onde  $\vec{n}$  é o versor diretor, sendo  $\vec{t}$  e  $\vec{m}$  chamados de co-diretores. Figura adaptada da fonte: Maurice Kleman and Oleg D Lavrentovich. *Soft matter physics: an introduction*. Springer Science & Business Media, 2007.



devido a sua estrutura simples. Isso faz com que haja interesse no estudo dos efeitos de superfície na fase nemática.

Na superfície, as moléculas nas proximidades podem ter uma orientação fixa. Esse comportamento de alinhamento com a superfície de contorno é conhecido como ancoramento, que mostra a interação entre a superfície líquido-cristalina e o substrato.

Figura 2.7: Ancoramento das moléculas entre duas superfícies planas: (a) planar, (b) inclinado e (c) homeotrópico. Figura adaptada da fonte: Djair Ferreira Almeida Melo. *Proposta de um diodo térmico feito de cristal líquido nemático*, Dissertação de Mestrado, Universidade Federal de Alagoas, 2015.



Podemos ter três tipos de ancoramento, sendo eles: homeotrópico (alinhamento perpen-

dicular as superfícies do substrato), planar (alinhamento paralelo as superfícies do substrato) e inclinado (alinhamento angular com a normal a superfície do substrato), mostrados na Figura 2.7 a), b) e c), respectivamente.

Existem ainda dois regimes de ancoramento, forte e fraco, podendo serem observados pela intensidade das interações das moléculas próximas à superfície. O ancoramento forte é quando as forças de superfície garantem uma direção bem definida ao diretor na superfície, mantendo as condições de contorno determinadas pelas superfícies. O ancoramento fraco é quando o ângulo entre o diretor e a normal da camada normal à superfície pode variar sob a influência de campos aplicados [62].

A energia conhecida como energia de ancoramento é a energia associada à interação da superfícies do material (por exemplo, vidro) que confinam o CL, com o próprio cristal líquido. As moléculas próximas da superfície interagem com o material de maneira distinta da interação com as moléculas internas.

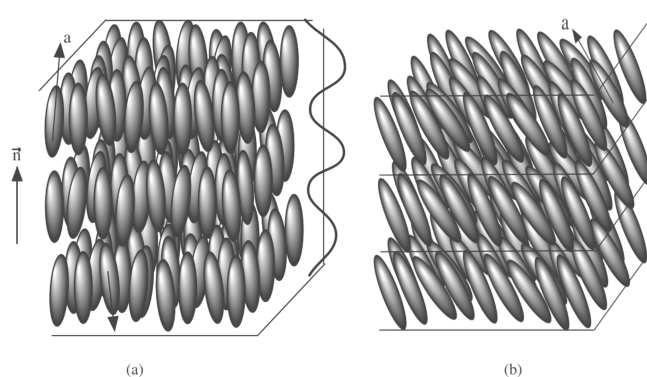
### 2.5.2 Esmética

A mesofase esmética é caracterizada por ser mais ordenada do que a nemática e por ter estruturas em camadas bem separadas, como mostrada na Figura 2.8. Essa característica se dá, em parte, à ordem orientacional de longo alcance e à ordem posicional parcial. Os materiais que podem apresentar essa mesofase, normalmente, são vistos como fluidos empilhados bidimensionalmente. Essa peculiaridade é devido ao comportamento cristalino na direção perpendicular às camadas, e fluidez na direção paralela a elas [63, 64]. Essa mesofase também possui uma classificação chamada de  $A$ ,  $B$ ,  $C$ , ..., que foi dada de acordo com a sua descoberta.

Na mesofase esmética  $A$  ( $SmA$ ), as moléculas ficam, em média, alinhadas com a normal perpendicular ao plano de camadas (Figura 2.8-(a)). O centro de massa das moléculas ficam ordenados de forma aleatória, e a espessura das camadas é igual ao comprimento das moléculas. Dessa maneira, praticamente existe um ordenamento posicional unidimensional de longo alcance. Essa mesofase é opticamente uniaxial com o eixo perpendicular às camadas [65].



Figura 2.8: Representação da fase (a) esmética A ( $SmA$ ) com modulação periódica de densidade, e da fase (b) esmética C ( $SmC$ ), onde o versor  $\vec{a}$  é a orientação de uma molécula individual, e o versor  $\vec{n}$  é o versor diretor. Figura adaptada da fonte: Maurice Kleman and Oleg D Lavrentovich. *Soft matter physics: an introduction*. Springer Science & Business Media, 2007.



A mesofase esmética  $C$  ( $SmC$ ) é estruturalmente parecida com a esmética  $A$ , mas as moléculas ficam inclinadas em relação aos planos das camadas (Figura 2.8-(b)). Dependendo do material, o ângulo de inclinação pode ser constante ou variar com a temperatura. Isso é devido as moléculas serem livres para rotacionar em torno de seus eixos. A mesofase esmética  $C$  é opticamente biaxial [65].

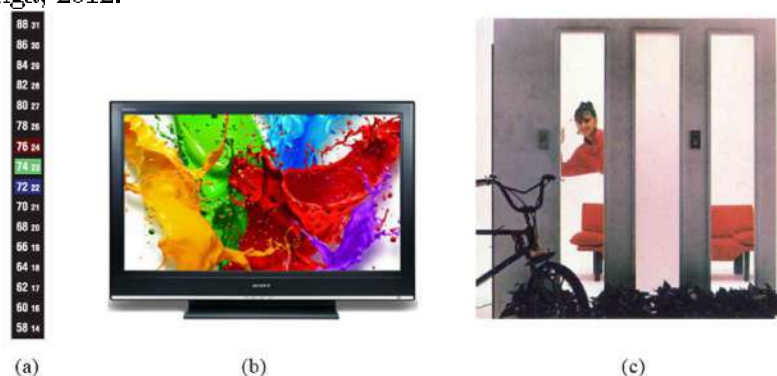
Além dessa classificação, a mesofase esmética pode ser diferenciada como  $SmA$ ,  $SmC$  ou  $SmA^*$ ,  $SmC^*$ , por exemplo, sendo definida sem asterisco para esmética não-quiral e com asterisco para esmética quiral.

## 2.6 Aplicações

As aplicações dos cristais líquidos podem ser encontradas em vários tipos de tecnologia, vamos ver agora alguns destaques para os CL termotrópicos e liotrópicos. Para os termotrópicos temos algumas aplicações como mostradores digitais de cristal líquido, o LCD (do inglês *Liquid Crystal Display*), encontrados em telas de celulares, televisores, telas de computadores, termômetros e em relógios (Figura 2.9).

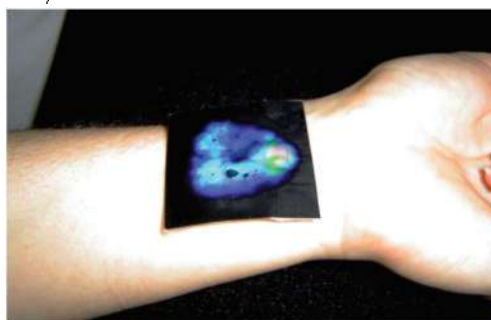
Em 2007, um grupo de Campinas, São Paulo, publicou um trabalho mostrando como desenvolver um dispositivo de cristal líquido colestérico capaz de mapear a temperatura do

Figura 2.9: (a) Termómetro digital com mostrador de cristal líquido. Disponível em: <https://bit.ly/2RQj0jn>. Acesso em: 07 de janeiro de 2019. (b) Televisor digital de cristal líquido e (c) janelas ópticas de CL. Figura adaptada da fonte: Renato Ribeiro Guimarães. Investigação da dinâmica de defeitos topológicos em sistema líquido-cristalino, Dissertação de Mestrado, Universidade Estadual de Maringá, 2012.



local onde for aplicado [66]. Segundo os autores, a propriedade de mapear as temperaturas com diferentes cores pode ser útil na construção de termômetros ou adesivos, como mostrado na Figura 2.10.

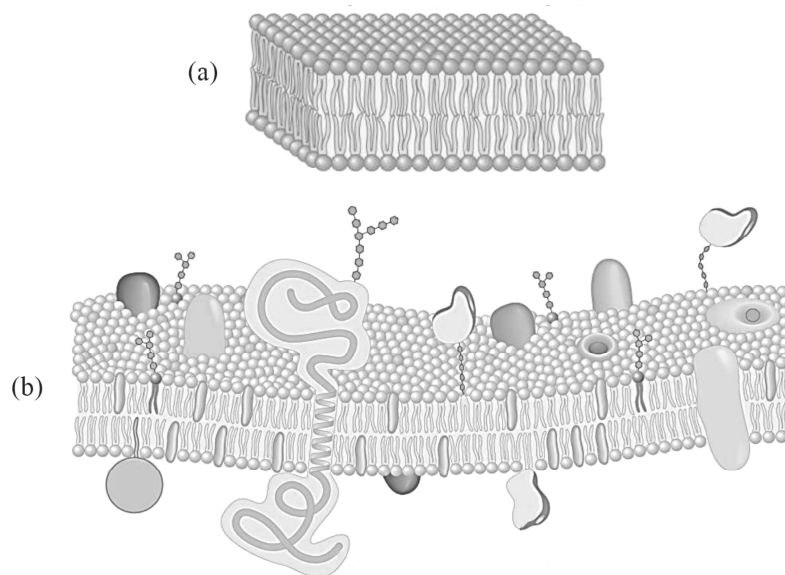
Figura 2.10: Mapeador térmico de cristal líquido colestérico. Fonte: Fernando Ely, MHMO Hamana, and Alaide Pellegrini Mammana. Cristais líquidos colestéricos: a quiralidade revela as suas cores. *Química Nova*, 30(7):1776, 2007.



Os cristais líquidos liotrópicos também são muito utilizados, como em ciências biológicas, no estudo de membranas. As membranas são formadas por bicamadas lipídicas, que por sua vez, são constituídas de moléculas anfífilas (Figura 2.11) . Essas bicamadas apresentam a mesofase lamelar, que funciona como a mesofase esméctica (termotrópica), só que para moléculas liotrópicas [47, 67–69].

Os cristais líquidos também são utilizados como laboratório cosmológico em vários tra-

Figura 2.11: (a) Representação de uma bicamada lipídica pura e (b) uma membrana: constituída com uma bicamada lipídica. Disponível em: <https://bit.ly/2QVxqOG>. Acesso em: 10 de janeiro de 2019.



balhos [12, 70–73], que utilizam de alguma analogia entre sistemas líquido-cristalino e o Cosmos.

Neste capítulo, vimos que os cristais líquidos possuem características muito úteis em aplicações tecnológicas da atualidade, e nesse caminho, estudar e compreender o comportamento desses tipos de materiais é essencial. Dessa maneira, o nosso trabalho busca investigar a influência de defeitos topológicos nas propriedades multifísicas e térmicas, de meios líquido-cristalinos, nas mesofases nemática e esmética, respectivamente.

# Capítulo 3

## Defeitos Topológicos em Cristais

### Líquidos

Os defeitos topológicos são estudados em diversas áreas da física, vistos na Cosmologia com um defeito na textura do espaço-tempo ou como uma falha na estrutura de um cristal. O versor diretor,  $\vec{n}$ , de uma amostra líquido-cristalina pode apresentar pontos nos quais não pode ser definido. Isso é por causa de deformações elásticas na amostra. Esses pontos ou linhas variam o versor diretor descontinuamente, assim como o parâmetro de ordem, criando assim, defeitos topológicos. Neste trabalho, utilizamos dois tipos de defeitos topológicos que serão apresentados mais a frente, neste capítulo.

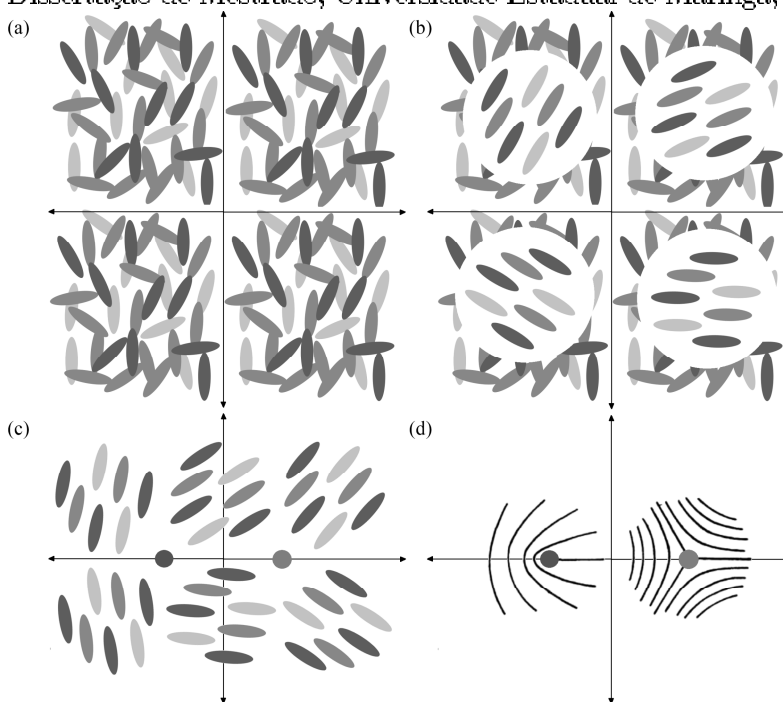
#### 3.1 Formação de Defeitos

Os defeitos podem ser formados por diferentes motivos, sejam eles topológicos, energéticos ou dinâmicos. Nos cristais líquidos, eles podem surgir de forma energética ou dinâmica: aplicando um campo externo [14, 15] ou sem aplicação de um campo externo [72, 74–76], respectivamente.

Uma maneira de exemplificar a criação de defeitos formados dinamicamente é através da variação de temperatura, provocando, dessa maneira, uma transição de fase de primeira ordem, da fase isotrópica (Figura 3.1-(a)) para a fase nemática, sem a necessidade da apli-

cação de um campo externo. Nos casos em que a temperatura varia muito rápido, devido à velocidade finita de propagação dessa informação (variação da temperatura), aparecem quebras de simetria com diferentes direções, em diferentes regiões do sistema. Desse modo, surge uma estrutura com orientações distintas do diretor em diferentes domínios (Figura 3.1-(b)). Essas diferentes orientações são devido às flutuações térmicas. Nas paredes dos domínios são formados os defeitos topológicos (Figura 3.1-(c)-(d)), que são criados aos pares. Esses defeitos tendem a sumir com tempo, pois, para garantir que a energia livre do sistema seja a mínima possível, eles se aniquilam, garantindo também a conservação da carga topológica [2, 65].

Figura 3.1: Esquemática da formação de defeitos, começando pela (a) fase isotrópica que (b) após sofrer uma quebra de simetria através de uma transição de fase, (c) cria defeitos no encontro de regiões de ordenamento distinto. (d) Temos então os defeitos já formados. Figura adaptada das fonte: Renato Ribeiro Guimarães. Investigação da dinâmica de defeitos topológicos em sistema líquido-cristalino, Dissertação de Mestrado, Universidade Estadual de Maringá, 2012.



Nas próximas seções, serão apresentados dois tipos de defeitos, desclinação e deslocação. Em seguida, mostraremos o defeitos utilizados em nosso trabalho, a desclinação radial em escape e a deslocação em aresta.

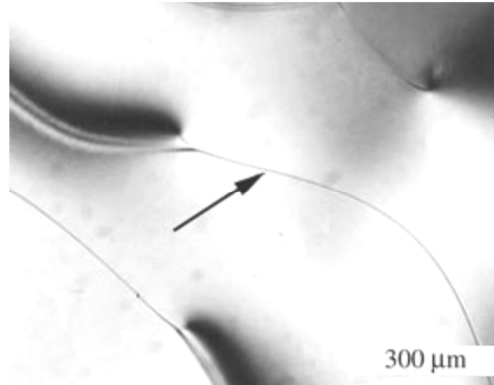
## 3.2 Desclinação

As desclinações são defeitos do tipo linha (Figura 3.2), e o caso mais simples foi primeiro estudado por Oseen, em 1933. O defeito estudado por Oseen foi a desclinação linha axial, que consiste em uma linha reta, onde o diretor é perpendicular à direção dessa linha. A configuração do diretor em torno dessa desclinação pode ser dada pelas componentes

$$\hat{n} = \begin{cases} n_x = \cos \beta(x, y) \\ n_y = \sin \beta(x, y) \\ n_z = 0 \end{cases} \quad (3.1)$$

onde  $\beta(x, y)$  é o ângulo entre o diretor,  $\vec{n}$  e o eixo  $x$  [65, 77, 78]. A variação posicional

Figura 3.2: Linhas de desclinação em um cristal líquido nemática visto através de um microscópio polarizador. Figura adaptada da fonte: Maurice Kleman and Oleg D Laverntovich. *Soft matter physics: an introduction*. Springer Science & Business Media, 2007.



do diretor pode provocar deformações, sendo as três mais conhecidas: splay (alargamento), twist (torção) e bend (flexão), apresentadas na Figura 3.3. A densidade de energia elástica é dada pela equação a seguir

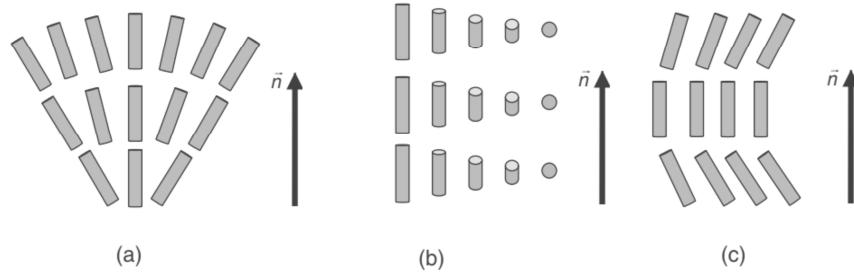
$$f_d = \frac{1}{2}K_{11}(\vec{\nabla} \cdot \hat{n})^2 + \frac{1}{2}K_{22}(\hat{n} \cdot (\vec{\nabla} \times \hat{n}))^2 + \frac{1}{2}K_{33}(\hat{n} \times (\vec{\nabla} \times \hat{n}))^2. \quad (3.2)$$

onde  $K_{11}$ ,  $K_{22}$  e  $K_{33}$  são as constantes elásticas de Frank presentes nos termos da equação associados à deformação do tipo splay, twist e bend, respectivamente [2, 3].

Fazendo a aproximação de constante única, ou seja, igualando as constantes elásticas de Frank, ou seja,  $K_{11} = K_{22} = K_{33} \equiv K$  [79–81], podemos reescrever a Equação 3.2,

$$f_d = \frac{K}{2} \left[ (\vec{\nabla} \cdot \hat{n})^2 + (\hat{n} \cdot (\vec{\nabla} \times \hat{n}))^2 + (\hat{n} \times (\vec{\nabla} \times \hat{n}))^2 \right], \quad (3.3)$$

Figura 3.3: As três possíveis deformações do diretor de um cristal líquido: (a) splay, (b) twist, e (c) bend. Figura adaptada da fonte: Deng-Ke Yang, *Fundamentals of liquid crystal devices*. John Wiley & Sons, 2014.



e usar a configuração do diretor mostrada na Equação (3.1).

Para obter cada termo da Equação (3.3),

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{n} = -\sin \beta \frac{\partial \beta}{\partial x} + \cos \beta \frac{\partial \beta}{\partial y},$$

$$\vec{n} \cdot (\vec{\nabla} \times \vec{n}) = 0,$$

$$\vec{n} \times (\vec{\nabla} \times \vec{n}) = \left( \sin \beta \cos \beta \frac{\partial \beta}{\partial x} + \sin^2 \beta \frac{\partial \beta}{\partial y} \right) \hat{i} - \left( \cos^2 \beta \frac{\partial \beta}{\partial x} + \sin \beta \cos \beta \frac{\partial \beta}{\partial y} \right) \hat{j}.$$

Assim, a Equação (3.3) se torna

$$f_d = \frac{K}{2} \left[ \left( \frac{\partial \beta}{\partial x} \right)^2 + \left( \frac{\partial \beta}{\partial y} \right)^2 \right] \quad (3.4)$$

ou

$$f_d = \frac{K}{2} |\vec{\nabla} \beta|^2. \quad (3.5)$$

Aqui chegamos na forma reduzida da densidade de energia livre de Oseen-Frank proveniente das desclinações no cristal líquido nemático. Neste momento, desejamos que a configuração do diretor em torno da desclinação minimize a densidade de energia livre elástica. Para isso, vamos utilizar as equações de Euler-Lagrange e obter a função  $\beta(x, y)$ ,

$$\frac{\partial f_d}{\partial \beta} - \frac{\partial}{\partial x} \left( \frac{\partial f_d}{\partial \beta'_x} \right) - \frac{\partial}{\partial y} \left( \frac{\partial f_d}{\partial \beta'_y} \right) = 0, \quad (3.6)$$

onde  $\beta'_x = \partial_x \beta$  e  $\beta'_y = \partial_y \beta$ . Usando a Equação (3.4), encontramos que

$$\frac{\partial^2 \beta}{\partial x^2} - \frac{\partial^2 \beta}{\partial y^2} = 0, \quad (3.7)$$

ou

$$\nabla_{x,y}^2 \beta = 0. \quad (3.8)$$

Essa é a equação de Laplace em duas dimensões em coordenadas cartesianas.

Dessa maneira, para encontrar a configuração do diretor em torno da desclinação, por questão de simetria, será feita uma mudança para coordenadas polares na Equação (3.7), onde

$$\left\{ \begin{array}{l} x = r \cos \varphi, \\ y = r \sin \varphi, \\ r = \sqrt{x^2 + y^2}, \\ \varphi = \arctan \left( \frac{y}{x} \right). \end{array} \right. \quad (3.9)$$

Assim, a Equação (3.7) fica da seguinte forma

$$\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( r \frac{\partial \beta}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 \beta}{\partial \varphi^2} = 0. \quad (3.10)$$

Resolvendo essa equação pelo método de separação de variáveis, podemos chegar a uma das soluções possíveis,

$$\beta(\varphi) = m\varphi + \beta_0; \quad m = \pm \frac{1}{2}, \pm 1, \pm \frac{3}{2}, \dots, \quad (3.11)$$

onde  $m$  e  $\beta_0$  são constantes.

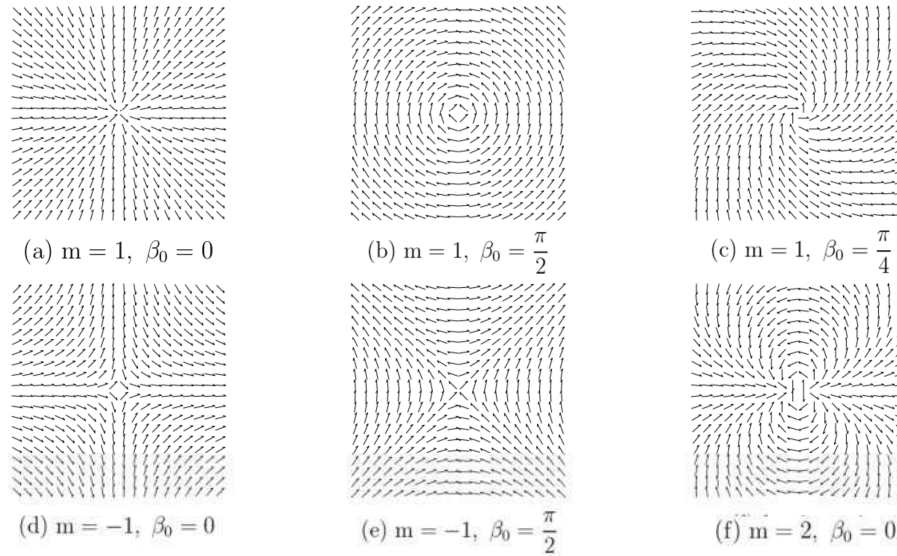
A solução dada pela Equação (3.11) é chamada de defeito axial e ela descreve a configuração do versor diretor em torno do defeito, que estão relacionados com a constante  $m$ . Desse modo, podemos dizer que os defeitos estão associados ao parâmetro  $m$ , que nos dá a intensidade da desclinação, e pode sofrer uma interferência através da constante  $\beta_0$  [65, 77, 78]. Também temos que a variação de 0 a  $2\pi$  em  $\varphi$  é correspondente a uma mudança de  $\beta_0$  a  $\beta_0 + 2m\pi$ . Podemos ver essas possíveis combinações na Figura 3.4.

### 3.2.1 Desclinação Radial em Escape

A desclinação utilizada em nosso trabalho [38] foi a desclinação radial em escape em nemático (Figura 3.5), encontrada em vários trabalhos na literatura [82–89], tanto para ancoramento forte quanto para ancoramento fraco. No próximo capítulo, será discutido como



Figura 3.4: Representações das possíveis configurações do diretor ao redor de uma desclinação. Fonte: Djair Ferreira Almeida Melo. Proposta de um diodo térmico feito de cristal líquido nemático, Dissertação de Mestrado, Universidade Federal de Alagoas, 2015.



esse defeito foi útil para nosso objeto de estudo, na qual a deslocação radial em escape é utilizada para projetar um diodo multifísico. Agora, serão apresentadas algumas propriedades básicas da desclinação radial em escape, a começar pelo diretor em coordenadas cilíndricas, descrito por

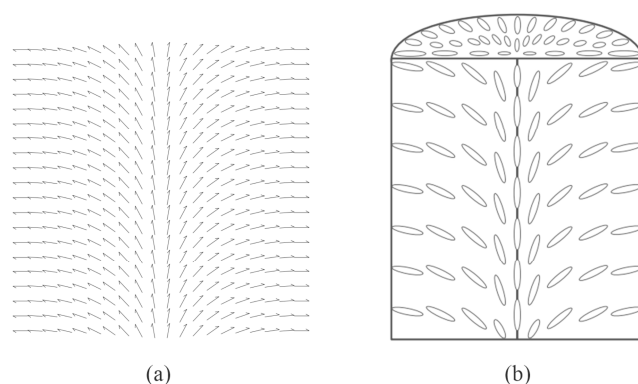
$$\hat{n} = \sin \beta(r) \hat{r} + \cos \beta(r) \hat{z}, \quad (3.12)$$

sendo  $\beta(r)$ , o ângulo entre o versor diretor e o eixo  $z$  e depende apenas do raio. O ângulo pode ser obtido através do método mostrado anteriormente para uma deslocação simples, agora resolvendo uma equação diferencial e obtendo como solução [90],

$$\beta(r) \approx 2 \arctan \left( \frac{r}{R} \tan \left( \frac{\beta_0}{2} \right) \right), \quad (3.13)$$

onde  $R$  é o raio do cilindro capilar que confina a deslocação radial em escape, e  $\beta_0$  é o ângulo de ancoramento. O diretor molecular da deslocação radial em escape e a estrutura com assimetria por inversão translacional ao longo do eixo quebram a simetria cilíndrica do tubo capilar nemático [1, 38]. Devido à essa estrutura quebra de simetria por inversão translacional ao longo do eixo, usamos essa desclinação para propor um diodo multifísico, retificador tanto de calor, quanto de luz.

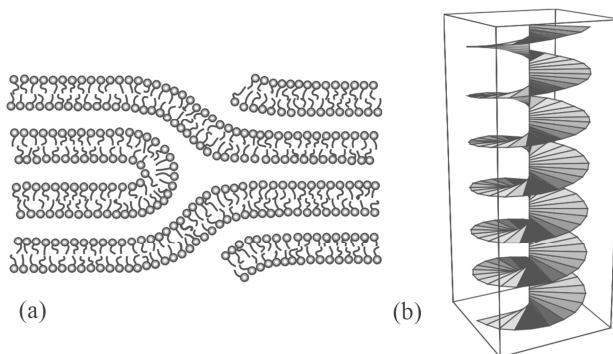
Figura 3.5: Representação da desclinação radial em escape: (a) em duas dimensões e (b) em três dimensões (metade do cilindro capilar). Figura adaptada da fonte: Djair Ferreira Almeida Melo. Proposta de um diodo térmico feito de cristal líquido nemático, Dissertação de Mestrado, Universidade Federal de Alagoas, 2015.



### 3.3 Deslocação em Cristal Líquido

Por causa de suas simetrias translacionais, os cristais líquidos esméticos e lamelar, posicionalmente ordenados mostram deslocações de translação de várias características. Dentre os tipos de deslocações, podemos citar o *edge dislocation* (deslocação em aresta) e o *screw dislocation* (deslocação em parafuso), mostrados na Figura 3.6, muito encontrados em trabalhos envolvendo CL [76, 91–95].

Figura 3.6: Representação da (a) deslocação em aresta e da (b) deslocação em parafuso. Figura adaptada da fonte: Fonte: Maurice Kleman and Oleg D Lavrentovich. *Soft matter physics: an introduction*. Springer Science & Business Media, 2007.



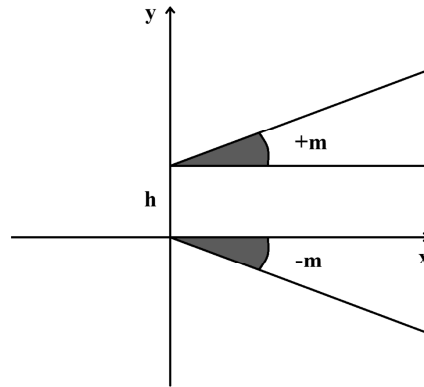
A deslocação em aresta pode ser encontrada em algumas mesofases como a esmética ( $Sm$ ) e a lamelar. Em nosso trabalho, usamos os parâmetros para uma deslocação em aresta

na mesofase esmética, assim como na desclinação radial em escape, para os CL nemáticos. Neste estudo buscamos obter o fenômeno de retificação, que explicaremos no próximo capítulo, devido à assimetria provocada pelo defeito.

### 3.3.1 Deslocação em Aresta em CL Esmético

Na mesofase esmética, vimos anteriormente que as moléculas formam uma estrutura de camadas. Quando uma camada é aniquilada ou criada, surge o defeito de translação mais simples e elementar, a deslocação em aresta. A deslocação em aresta é formada por um par de desclinações, que por sua vez, possuem ângulos  $\pm m$ , que são utilizados para determinar o quanto do material foi removido ou inserido, e são distanciadas por  $h$ , como mostrado na Figura a seguir [96].

Figura 3.7: Representação do par de desclinações criando uma deslocação em aresta. Figura adaptada da fonte: Fernando Moraes. Geodesics around a dislocation. *Physics Letters A*, 214(3-4): 189-192, 1996.



Segundo Katanaev [107], no limite do contínuo, essa deslocação pode ser descrita à longa distância pela métrica

$$ds^2 = dz^2 + \left(1 + \frac{m}{2\pi} \frac{2hr \sin \theta - h^2}{r^2}\right) (dr^2 + r^2 d\theta^2), \quad (3.14)$$

em coordenadas cilíndricas. Essa métrica também pode ser reescrita, caso haja interesse em efeitos à longa distância (mais do que a anterior) do defeito, ou seja, fazendo  $r \gg h$ , negligenciando o termo  $h^2/r^2$ ,

$$ds^2 = \left(1 - \frac{b}{\pi} \frac{y}{x^2 + y^2}\right) (dx^2 + dy^2). \quad (3.15)$$

---

Através dessas métricas, os fônons podem sentir os efeitos térmicos da deslocação em aresta (elas são sentidas efetivamente pelos fônons, não sendo a métrica do espaço-tempo, que continua plana). Utilizando essas métricas, tentamos obter algumas propriedades térmicas através do tensor condutividade térmica, que será mostrado no capítulo seguinte.

# Capítulo 4

## As Propriedades Multifísicas dos Cristais Líquidos

Neste capítulo, serão mostradas algumas propriedades essenciais para o desenvolvimento de um diodo multifísico a base de cristal líquido nemático, e de um diodo térmico feito de cristal líquido esmétrico. Começando pela anisotropia de propagação, onde explicitaremos como foram obtidas as propriedades térmicas e ópticas do CL nemático. Em seguida, a seção referente às propriedades tensoriais do CLN com deslocação radial em escape mostra o que precisamos saber para efetuar as simulações. Mais adiante, faremos o mesmo procedimento para o tensor condutividade térmica dos CLSm com deslocação em aresta.

### 4.1 Propagação Anisotrópica

Sabemos que os cristais líquidos possuem anisotropia nas propriedades físicas, ou seja, propriedades como condutividade térmica, permissividade elétrica e permeabilidade magnética apresentam diferentes valores ao longo do diretor e em direções perpendiculares a ele. Essas propriedades podem ser representadas tensorialmente.

As propriedades térmicas [1, 76, 97–99] e ópticas [75, 100–103] de um CL nemático podem ser descritas por um tensor geométrico de segunda ordem, ou pela métrica [104],

$$\alpha_{ij} = \alpha_{iso}\delta_{ij} + \alpha_{aniso} \left( n_i n_j - \frac{\delta_{ij}}{3} \right) = g_{ij}. \quad (4.1)$$

Onde,

$$\alpha \equiv \begin{Bmatrix} \lambda \\ \epsilon \\ \mu \end{Bmatrix}, \quad \alpha_{iso} = \frac{\alpha_{\parallel} + 2\alpha_{\perp}}{3} \quad \text{e} \quad \alpha_{aniso} = \alpha_{\parallel} - \alpha_{\perp}, \quad (4.2)$$

sendo  $n_i$  e  $n_j$  as componentes do vetor diretor,  $\lambda_{ij}$  o tensor condutividade térmica,  $\epsilon_{ij}$  o tensor permissividade elétrica,  $\mu_{ij}$  o tensor permeabilidade magnética,  $g_{ij}$  a métrica, e  $\delta_{ij}$  a delta de Kronecker. Os termos  $\alpha_{iso}$  e  $\alpha_{aniso}$  representam as condutividades térmicas, permissividades elétricas ou permeabilidades magnéticas isotrópica e anisotrópica do material, respectivamente [38]. E os índices  $\parallel$  e  $\perp$ , nesta ordem, significam paralelo e perpendicular.

Os índices de refração molecular paralelo,  $n_{\parallel}$ , e perpendicular,  $n_{\perp}$ , são representados por [105]

$$n_{\parallel}(T) = A - BT + \frac{2(\Delta n)_o}{3} \left(1 - \frac{T}{T_c}\right)^{\gamma}, \quad (4.3)$$

$$n_{\perp}(T) = A - BT - \frac{(\Delta n)_o}{3} \left(1 - \frac{T}{T_c}\right)^{\gamma}. \quad (4.4)$$

Assim como, as condutividades térmica molecular paralela,  $\lambda_{\parallel}$ , e perpendicular,  $\lambda_{\perp}$ , são definidas [106]

$$\lambda_{\parallel}(T) = \lambda_0 + \lambda_1(T - T_{NI}) + \lambda_{1,\parallel}(T_c - T)^{b_{\parallel}}, \quad (4.5)$$

$$\lambda_{\perp}(T) = \lambda_0 + \lambda_1(T - T_{NI}) + \lambda_{1,\perp}(T_c - T)^{b_{\perp}}, \quad (4.6)$$

onde  $A$ ,  $B$ ,  $\gamma$ ,  $\lambda_0$ ,  $\lambda_1$ ,  $\lambda_{1,\parallel}$ ,  $\lambda_{1,\perp}$ ,  $b_{\parallel}$  e  $b_{\perp}$  são constantes do material [38].

## 4.2 Propriedades Tensoriais do CLN com uma Desclinação Radial em Escape

Vimos anteriormente como é definido o tensor geométrico responsável por fornecer as propriedades térmicas e ópticas do CL nemático. Agora, iremos mostrar como esse tensor é modificado na presença de uma desclinação radial com escape em um tubo capilar cilíndrico de cristal líquido nemático.

O tensor geométrico será uma matriz de nove elementos, que em coordenadas cilíndricas é da seguinte forma

$$\alpha_{ij} = \begin{bmatrix} \alpha_{rr} & \alpha_{r\phi} & \alpha_{rz} \\ \alpha_{\phi r} & \alpha_{\phi\phi} & \alpha_{\phi z} \\ \alpha_{zr} & \alpha_{z\phi} & \alpha_{zz} \end{bmatrix}. \quad (4.7)$$

Sabendo que a componente  $n_\phi = 0$  devido à simetria axial do capilar, temos  $\alpha_{r\phi} = \alpha_{\phi z} = 0$ . Ainda temos que o tensor geométrico é simétrico, ou seja,  $\alpha_{ij} = \alpha_{ji}$ . Dessa maneira, temos

$$\alpha_{ij} = \begin{bmatrix} \alpha_{rr} & 0 & \alpha_{rz} \\ 0 & \alpha_{\phi\phi} & 0 \\ \alpha_{zr} & 0 & \alpha_{zz} \end{bmatrix}. \quad (4.8)$$

Para obter os termos  $n_r$  e  $n_z$ , usamos as Equações (3.12) e (3.13) e temos que

$$n_r = \cos \left\{ 2 \arctan \left[ \frac{r}{R} \tan \left( \frac{\beta_0}{2} \right) \right] \right\}, \quad (4.9)$$

e

$$n_z = \sin \left\{ 2 \arctan \left[ \frac{r}{R} \tan \left( \frac{\beta_0}{2} \right) \right] \right\}. \quad (4.10)$$

Como em coordenadas cilíndricas o tensor métrico do espaço plano é dado por

$$\delta_{ij} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & r^2 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}, \quad (4.11)$$

podemos usar os resultados obtidos de  $n_r$ ,  $n_z$  e as Equações (4.1) e (4.2) para encontrar a matriz do tensor geométrico

$$\alpha_{ij} = \begin{bmatrix} \alpha_\perp n_z^2 + \alpha_\parallel n_r^2 & 0 & 2Rr(\alpha_\parallel - \alpha_\perp)n_z n_r \\ 0 & r^2 \alpha_\perp & 0 \\ (\alpha_\parallel - \alpha_\perp)n_z n_r & 0 & \alpha_\perp n_r^2 + \alpha_\parallel n_z^2 \end{bmatrix} \quad (4.12)$$

### 4.3 Tensor Condutividade Térmica dos CLSm com Deslocação em Aresta

Para definir o tensor condutividade térmica de um cristal líquido esmétrico na presença de uma deslocação em aresta, usaremos a Lei de Fourier que relaciona o vetor fluxo de calor

$q_i$  com a condutividade térmica e o gradiente de temperatura, como descrita a seguir

$$q_i = -k_{ij} \frac{\partial T}{\partial x_j}. \quad (4.13)$$

Mas o fluxo de calor pode ser descrito incluindo o tensor métrico [76, 107]. Dessa forma,

$$q_i = -kg_{ij} \frac{\partial T}{\partial x_j}, \quad (4.14)$$

onde  $k_{ij} = kg_{ij}$  e  $k$  é a condutividade térmica do material. Aqui o tensor métrico pode representar o defeito e determinar como a deslocação em aresta perturba as propriedades térmicas do sistema.

No capítulo anterior, vimos que a deslocação em aresta pode ser descrita pelas métricas das Equações (3.14) e (3.15). Assim, os tensores condutividade térmica podem ser escritos nas duas situações como sendo

$$k_{ij} = k \begin{bmatrix} 1 + \frac{m}{2\pi} \frac{2hr \sin \theta - h^2}{r^2} & 0 & 0 \\ 0 & 1 + \frac{2mhr \sin \theta - h^2}{2\pi} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}, \quad (4.15)$$

em coordenadas cilíndricas, para resultados relativamente próximos ao defeito, e

$$k_{ij} = k \begin{bmatrix} 1 - \frac{b}{\pi} \frac{y}{x^2 + y^2} & 0 \\ 0 & 1 - \frac{b}{\pi} \frac{y}{x^2 + y^2} \end{bmatrix}, \quad (4.16)$$

em coordenadas cartesianas, para resultados longe da deslocação.

Diante dessas propriedades podemos seguir para os próximos capítulos, onde explicitaremos com detalhe como os diodos foram simulados.



## Capítulo 5

# Diodo Multifísico de Cristal Líquido Nemático

Em 2016, Melo e outros propuseram um diodo térmico feito de cristal líquido nemático [1]. Nesse trabalho, eles utilizaram a desclinação radial em escape confinada em um tubo capilar, e obtiveram resultados de retificação térmica em torno de 3,5%, similar a um diodo feito de nanotubo de carbono [23]. Usando um tubo capilar em forma de tronco de cone, Silva e outros confinaram uma deslocação radial em escape e encontraram uma retificação térmica em torno de 1226% [97], muito melhor do que dispositivos de elementos balísticos assimétricos [35], e de junções intramolecular de nanotubos de carbono [108], ou feitos de óxido de grafeno [109].

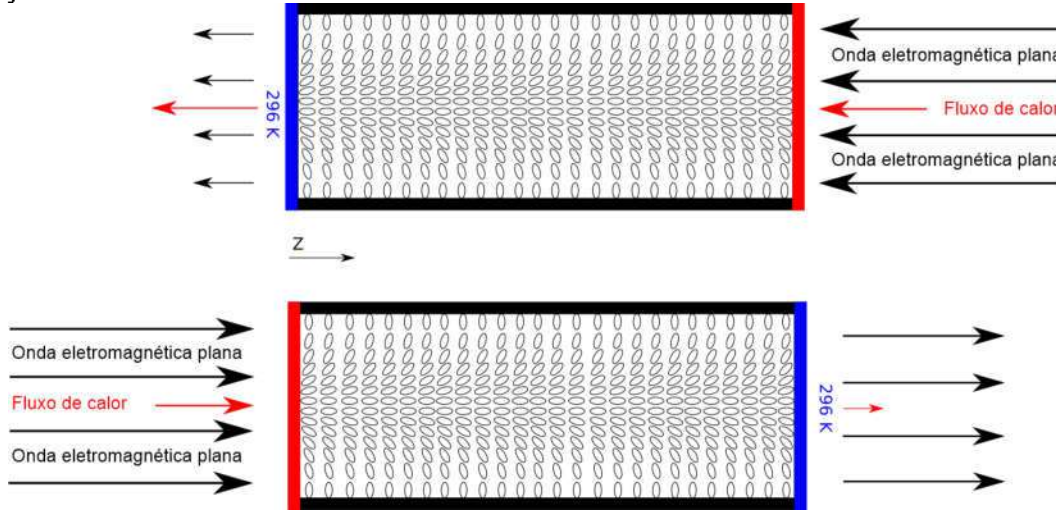
Na proposta do dispositivo multifísico, utilizamos a desclinação radial em escape estudada por Melo [1], onde ele viu que a direção direta do diodo térmico está no mesmo sentido do escape. Dessa maneira, usamos uma configuração semelhante para tentar retificar luz<sup>1</sup>, o que fez com que o dispositivo já estudado termicamente, fosse utilizado para ambas funções, como mostrado na Figura 5.1.

Os resultados apresentados nesse capítulo enfatizam a retificação óptica, uma vez que temos resultados para retificação térmica de uma desclinação radial em escape na literatura [1]. Para isso, usamos o campo molecular da desclinação (3.12) e as propriedades

---

<sup>1</sup>Dificultar a propagação da luz em um sentido em relação ao sentido oposto.

Figura 5.1: Representação do diodo multifísico. Visão axial do tubo capilar confinando a desclinação radial em escape na direção  $-\hat{z}$ . Para os resultados de Melo [1], a direção direta térmica do diodo é na direção da desclinação radial em escape, enquanto em nosso trabalho a direção direta óptica é na direção  $+\hat{z}$ .



moleculares dependentes da temperatura, (4.4) e (4.6), do cristal líquido nemático 5CB (4-pentil-4-cianobifenil) para obter as componentes do tensor (4.1) de condutividade térmica, permissividade elétrica e permeabilidade magnética no software COMSOL Multiphysics. Definida a direção do fluxo de calor, resolvemos as equações de Fourier e Laplace no COMSOL para obter o campo espacial de temperatura e as equações de onda eletromagnética.

Podemos definir a retificação óptica como

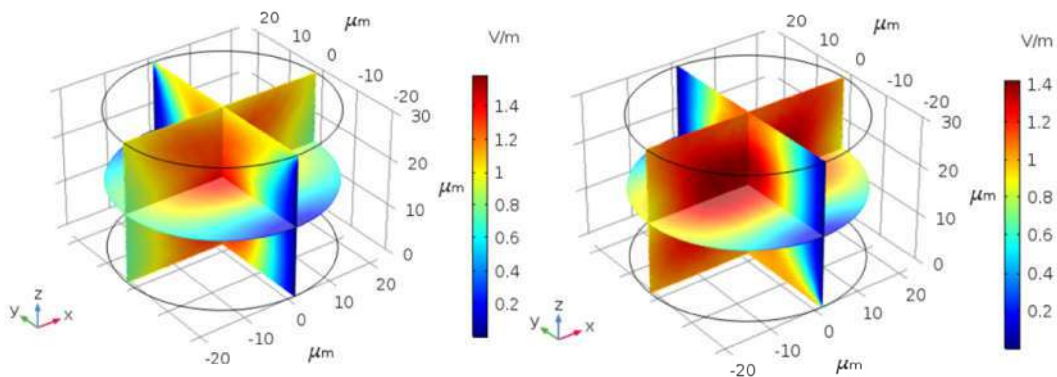
$$\text{Retificação Óptica} = \left| \frac{\Delta E_r^2 - \Delta E_f^2}{\Delta E_f^2} \right|, \quad (5.1)$$

onde  $\Delta E_r^2 \equiv E_{i,r}^2 - E_{e,r}^2$ ,  $\Delta E_f^2 \equiv E_{i,f}^2 - E_{e,f}^2$  e  $E_{i,r}(E_{e,r})$  é a magnitude do campo elétrico da onda eletromagnética no interior (exterior) na direção reversa do diodo óptico. Assim,  $E_{i,f}(E_{e,f})$  tem a mesma representação, e  $f$  indica a direção direta do diodo.

O funcionamento do dispositivo de acordo com a intensidade do campo elétrico incidente é mostrado na Figura 5.2. Os parâmetros utilizados foram: magnitude da radiação incidente  $1 \text{ V/m}$ , fluxo de calor  $Q = 5 \text{ kW/m}^2$ , raio  $R = 20 \text{ }\mu\text{m}$ , comprimento  $H = 30 \text{ }\mu\text{m}$ , comprimento de onda  $\lambda = 50 \text{ }\mu\text{m}$  e ângulo de ancoramento  $\beta_0 = 90^\circ$ . A retificação óptica medida foi de aproximadamente 27% além de que para todos os resultados seguintes, vimos que sentido direto do diodo estava contrário à desclinação radial em escape, que foi estabelecida

na direção  $-\hat{z}$ . Este sentido direto óptico é oposto ao sentido direto térmico, como vimos anteriormente [1]. A explicação para o sentido direto óptico vem do princípio de Fermat, que diz que a trajetória da luz de um ponto a outro é a aquela na qual o tempo gasto é o mínimo possível. Assim, a birrefringência ( $n_{\parallel} > n_{\perp}$ ) de um 5CB e a quebra de simetria de inversão translacional ao longo do eixo faz com que a luz siga mais facilmente na direção oposta à desclinação radial em escape e com mais dificuldade na mesma direção da desclinação. Esse resultado pode ser visto em sistemas semelhantes relatados em [32].

Figura 5.2: Intensidade do campo elétrico, com um fluxo de calor na direção  $-\hat{z}$ , quando a luz viagem na direção  $-\hat{z}$  (esquerda) e na direção  $+\hat{z}$  (direita). Os parâmetros usados foram a magnitude da radiação incidente de  $1 \text{ V/m}$ , fluxo de calor  $Q = 5 \text{ kW/m}^2$ , raio  $R = 22 \text{ }\mu\text{m}$ , comprimento  $H = 30 \text{ }\mu\text{m}$ , comprimento de onda  $\lambda = 50 \text{ }\mu\text{m}$  e ângulo de ancoramento  $\beta_0 = 90^\circ$ .

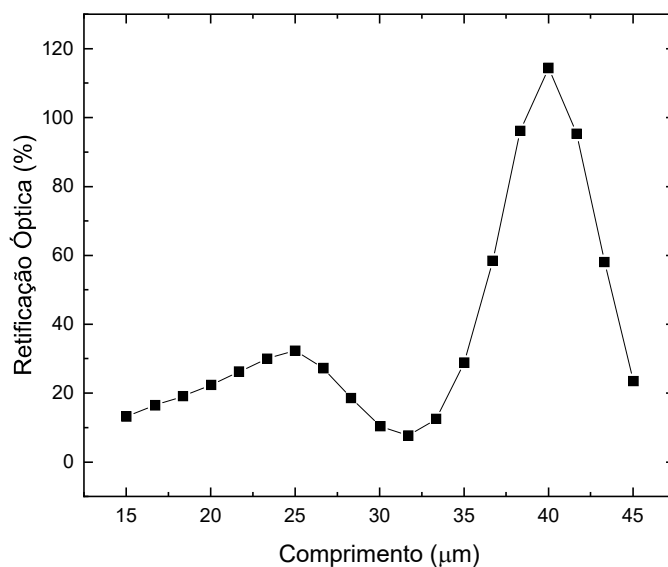


## 5.1 Influência da forma, do calor e do ângulo de ancoramento

O tamanho do dispositivo está diretamente ligado ao custo de material para sua construção. Pois, quanto menor o dispositivo, menor serão os gastos. Na Figura 5.3 vemos a retificação óptica sob influência do comprimento do capilar. Para isso usamos um fluxo de calor de  $Q = 5 \text{ kW/m}^2$  na direção  $-\hat{z}$ , um raio de  $R = 30 \text{ }\mu\text{m}$ , ângulo de ancoramento de  $\beta_0 = 90^\circ$  e comprimento de onda de  $\lambda = 50 \text{ }\mu\text{m}$ . Através da regressão linear (linha verme-

lha) da Figura 5.3 podemos ver que a retificação aumenta com o aumento do comprimento. Esse resultado mostra que quanto maior o comprimento, mais material teremos para desviar a luz, assim aumentando a retificação óptica. Uma observação é a redução da retificação para os comprimentos de  $H$  próximos de  $15 \mu\text{m}$ ,  $30 \mu\text{m}$  e  $45 \mu\text{m}$ , ou  $H \approx nR/2$ , onde  $n = 1, 2, 3, \dots$ . Esse resultado é uma característica de um fenômeno ondulatório e já era esperado, como podemos ver em [24, 29].

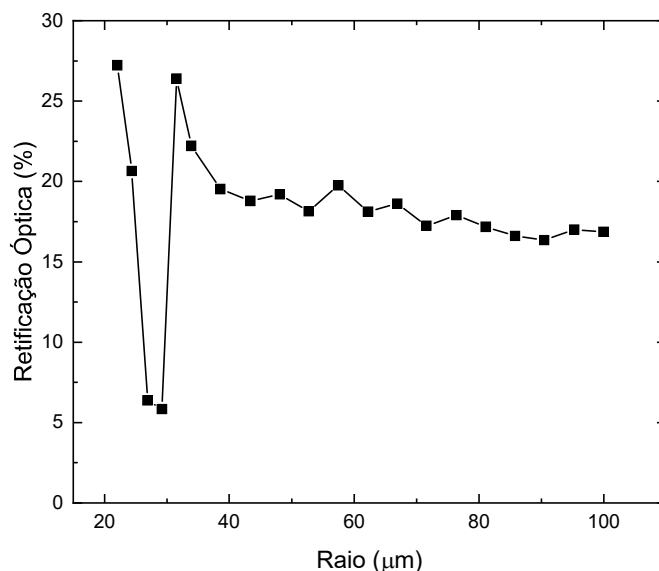
Figura 5.3: Retificação óptica em função do comprimento do diodo com o fluxo de calor na direção  $-\hat{z}$ . Os parâmetros utilizados foram magnitude da radiação incidente de  $1 \text{ V/m}$ , fluxo de calor de  $Q = 5 \text{ kW/m}^2$  na direção  $-\hat{z}$ , raio de  $R = 30 \mu\text{m}$ , ângulo de ancoramento de  $\beta_0 = 90^\circ$  e comprimento de onda de  $\lambda = 50 \mu\text{m}$ .



Da mesma forma que o comprimento, o tamanho do raio faz diferença na garantia de um menor custo. O raio também deve estar de acordo com a finalidade de onde o diodo vai ser aplicado. Na Figura 5.4 temos um esboço da retificação influenciada pelo raio do diodo óptico. Os parâmetros utilizados foram fluxo de calor de  $Q = 5 \text{ kW/m}^2$  na direção  $-\hat{z}$ , comprimento de  $H = 30 \mu\text{m}$ , ângulo de ancoramento de  $\beta_0 = 90^\circ$  e comprimento de onda de  $\lambda = 50 \mu\text{m}$ . A retificação sofre uma diminuição brusca para raios entre  $50 \mu\text{m}$  e  $100 \mu\text{m}$  ( $R > \lambda$ ) e uma grande oscilação para raios menores que  $50 \mu\text{m}$  ( $R < \lambda$ ). Para raios maiores que  $\lambda$ , a orientação molecular local tende a ficar constante, esse detalhe reduz

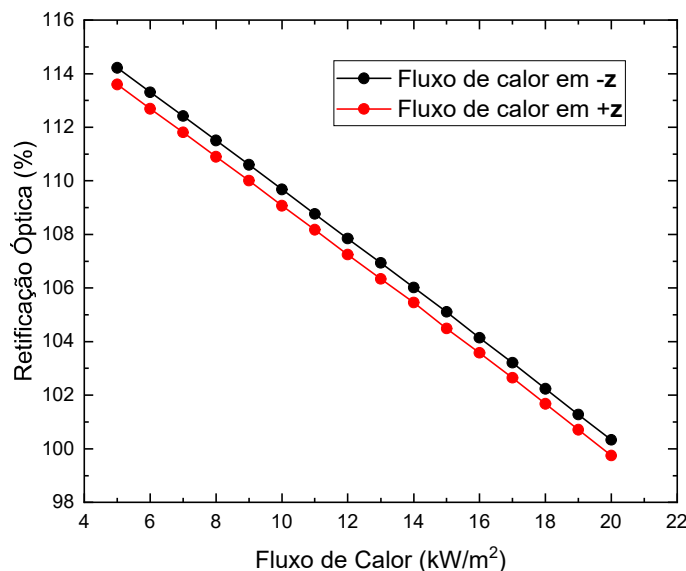
a anisotropia espacial, e como resultado, a retificação. No entanto, para raios menores que  $\lambda$ , o comprimento de onda de corte para guias de ondas circulares torna-se próximo ao comprimento de onda incidente [110], dessa maneira, aumenta a anisotropia translacional ao longo do eixo da velocidade da luz, surgindo assim as oscilações mostradas na Figura 5.4.

Figura 5.4: Retificação óptica em função do raio do diodo com o fluxo de calor na direção  $-\hat{z}$ . Os parâmetros usados foram fluxo de calor de  $Q = 5 \text{ kW/m}^2$ , magnitude da radiação incidente  $1 \text{ V/m}$ , comprimento  $H = 30 \text{ }\mu\text{m}$ , ângulo de ancoramento  $\beta_0 = 90^\circ$  e comprimento de onda de  $\lambda = 50 \text{ }\mu\text{m}$ .



Dependendo de onde o diodo vai ser usado, o fluxo de calor do sistema pode variar e modificar a retificação óptica. Para fazer essa análise, observamos na Figura 5.5 a retificação óptica em função do fluxo de calor e do sentido do fluxo. Os parâmetros utilizados foram ângulo de ancoramento de  $\beta_0 = 90^\circ$ , raio de  $R = 30 \text{ }\mu\text{m}$  e comprimento de onda de  $\lambda = 50 \text{ }\mu\text{m}$ . A retificação óptica diminui quando aumentamos o fluxo de calor, como a fluxo de calor aumenta a temperatura local, reduzindo assim a birrefringência molecular,  $n_{\parallel} - n_{\perp}$ , e o efeito de retificação. Esse resultado é semelhante ao mostrado em [24], onde a retificação óptica diminui com ruído térmico. Também percebemos que a retificação decresce quando o fluxo de calor é incidido na direção  $+\hat{z}$ . Mesmo com esse resultado, o fluxo de calor cria temperaturas locais um pouco mais altas quando flui no sentido de  $-\hat{z}$ , a sentido direto para a retificação térmica.

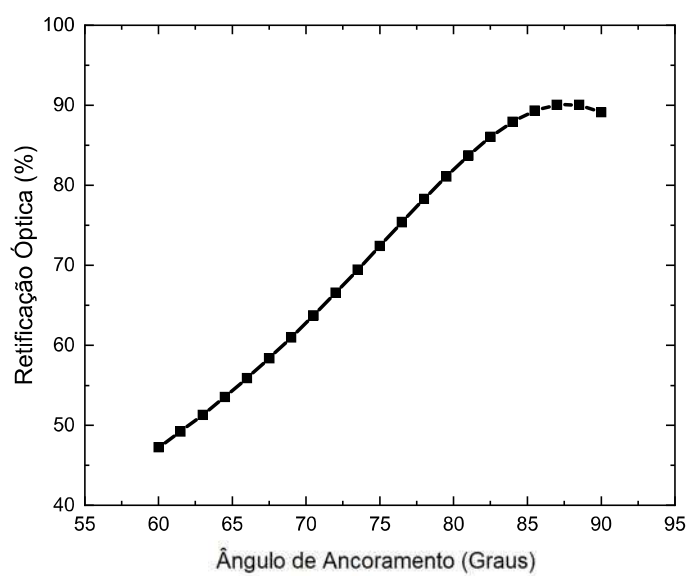
Figura 5.5: Retificação óptica em função da magnitude do fluxo de calor nas direções  $-\hat{z}$  (preto) e  $+\hat{z}$  (vermelho). Os parâmetros utilizados foram magnitude da radiação incidente de  $1 \text{ V/m}$ , raio  $R = 30 \text{ }\mu\text{m}$ , comprimento  $H = 40 \text{ }\mu\text{m}$ , comprimento de onda  $\lambda = 50 \text{ }\mu\text{m}$  e ângulo de ancoramento  $\beta_0 = 90^\circ$ .



Os procedimentos físicos e/ou químicos usados para ajustar a superfície interna do tubo capilar mantém o ângulo de ancoramento fixo. O ângulo de ancoramento define o comportamento radial da desclinação radial em escape, assim como também influencia na retificação óptica. Na Figura 5.6 observamos a retificação óptica versus o ângulo de ancoramento. Obtivemos uma retificação máxima para o ângulo de ancoramento  $\beta_0$  em torno de  $87^\circ$ . Mesmo não mostrado, a retificação diminui lentamente para  $\beta_0 < 60^\circ$ , como também para  $\alpha$  maior do que o mostrado na Figura 5.6. Esse comportamento está relacionado à anisotropia axial do diodo, que para ângulos longe do ângulo de retificação máxima, a anisotropia diminui. Um resultado semelhante é visto na retificação térmica mostrado em [1], com os mesmos parâmetros geométricos, entretanto, para diferente ângulo de ancoramento. A diferença entre os ângulos para cada tipo de energia é uma característica dos diferentes mecanismos de propagação (difusão para o calor e ondas em movimento para a luz). Os valores máximos da retificação óptica estão de acordo com [31].

O estudo da retificação térmica de [1] mostra que quando, separadamente, o fluxo de

Figura 5.6: Retificação óptica em função do ângulo de ancoramento. Os parâmetros usados foram: magnitude da radiação incidida  $1 \text{ V/m}$ , comprimento  $H = 50 \text{ }\mu\text{m}$ , raio  $R = 60 \text{ }\mu\text{m}$ , comprimento de onda  $\lambda = 50 \text{ }\mu\text{m}$  e fluxo de calor de  $Q = 5 \text{ kW/m}^2$  na direção  $-\hat{z}$ .



calor e a comprimento diminui, o raio aumenta e obtemos o ângulo de ancoramento adequado, a retificação aumenta. Esses bons resultados para a retificação térmica provocada pela desclinação radial em escape, juntos aos resultados aqui apresentados, nos permite o desenvolvimento de um diodo multifísico [38].

## Capítulo 6

# Diodo Térmico de Cristal Líquido

## Esmético

No decorrer da evolução eletrônica, surgiram dispositivos a fim de controlar correntes elétricas como diodos e transistores. Seguindo essa mesma linha de necessidade, a investigação do transporte térmico e da manipulação de correntes de calor serviu para a aproveitamento da energia térmica em dispositivos modernos. Assim, surgiram vários trabalhos teóricos e experimentais buscando criar dispositivos de estrutura cristalina para manipular o transporte térmico [23, 25, 111].

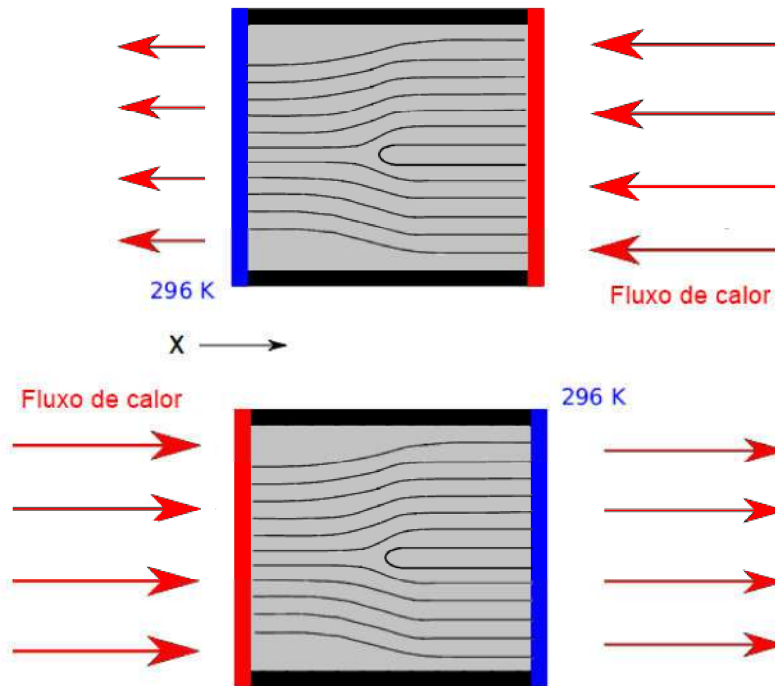
Há não muito tempo, o processamento de informações era prejudicado pelo desperdício de energia dissipado na forma térmica (calor). Afim de mudar esse quadro, várias pesquisas foram realizadas na tentativa de formular modelos adaptados, onde os fônons pudessem ser manipulados assim como os elétrons e os fótons, podendo assim, controlar o transporte térmico [27]. Dessa maneira, vários trabalhos foram surgindo, tanto na utilização de estruturas cristalinas [23, 25, 111], como fazendo uso de cristais líquidos [1, 76, 98, 99], para o aproveitamento dessa energia térmica.

Com esse pensamento, propomos o funcionamento de um diodo térmico usando uma deslocação em aresta confinada em um cristal líquido esmético. Para isso, utilizamos a métrica que descreve a o comportamento térmico em torno do defeito como tensor condutividade térmica, (4.16), e as propriedades exigidas pelo software (COMSOL Multiphysics)



como a densidade e a capacidade térmica para um cristal líquido 8CB que pode reproduzir a fase esmética. Após definir a direção do fluxo de calor, solucionamos a equação de Fourier para obter o campo espacial de temperatura.

Figura 6.1: Representação do diodo térmico. Visão lateral das camadas esméticas com a deslocação em aresta com a direção direta do diodo na direção  $+\hat{x}$ .



Primeiro definimos uma temperatura fixa de  $T = 296 \text{ K}$  em um dos lados do dispositivo, e incidimos um fluxo de calor a uma taxa de  $Q = 5 \text{ kW/m}^2$  no lado oposto. Depois repetimos o mesmo procedimento invertido, mantendo a temperatura fixa do outro lado e incidindo  $Q$  no lado que a temperatura foi fixada anteriormente. Dessa maneira, podemos observar se há retificação térmica [1, 76].

A definição para retificação térmica é dada por

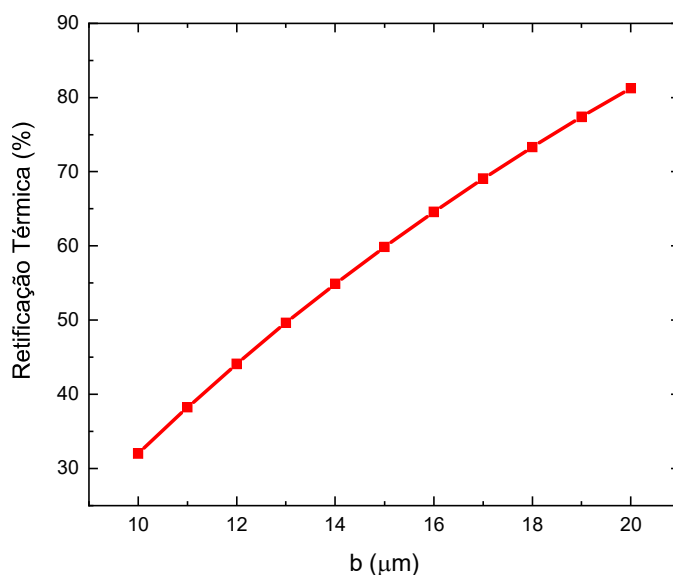
$$\text{Retificação Térmica} = \left| \frac{\Delta T_r - \Delta T_f}{\Delta T_f} \right|, \quad (6.1)$$

onde  $\Delta T_r = T_{r,m} - 296 \text{ K}$  é a diferença entre a temperatura maior produzida pelo calor inserido no sistema,  $T_{r,m}$ , quando segue a direção *inversa* do dispositivo e  $296 \text{ K}$  é a temperatura inicial. Similarmente, temos para  $\Delta T_f = T_{f,m} - 296 \text{ K}$  quando segue o sentido direto do diodo.

Encontramos que a direção direta do diodo é na direção  $+\hat{x}$  (Figura 6.1), que é o sentido que surge camada de esmético. Esse resultado é devido ao aumento da quantidade de material, facilitando a propagação dos fônons.

A quantidade de camadas que terminam na deslocação em aresta está diretamente ligada à intensidade do vetor de Burger, sendo o único parâmetro que pudemos variar dentro da métrica do defeito. Na Figura 6.2 observamos o efeito do vetor de Burger,  $b$ , na retificação térmica. Os parâmetros utilizados foram temperatura inicial de  $T = 296$  K, fluxo de calor de  $Q = 5$  kW/m<sup>2</sup> e comprimento de  $L = 100$   $\mu$ m. A retificação térmica aumenta de acordo com o crescimento do vetor de Burger quase que linearmente. Esse resultado é devido à assimetria provocada pela quantidade de camadas destruídas [97].

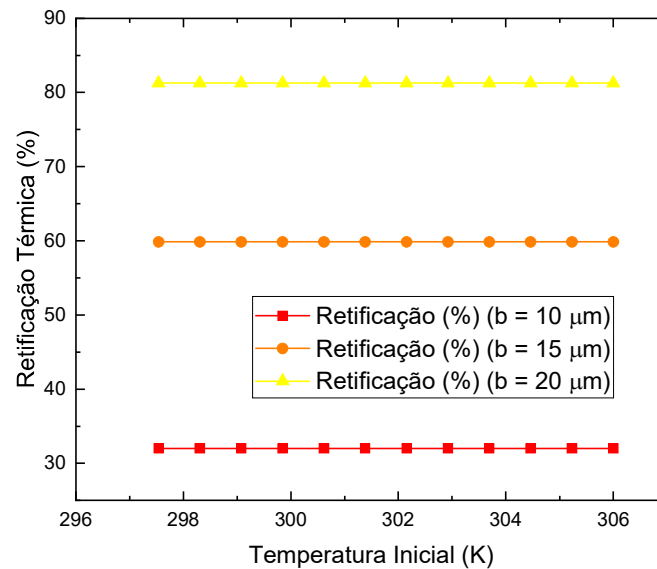
Figura 6.2: Retificação térmica na direção  $+\hat{x}$  em função da magnitude do vetor de Burger. Os parâmetros usados foram: temperatura inicial de  $T = 296$  K, fluxo de calor de  $Q = 5$  kW/m<sup>2</sup> e comprimento de  $L = 100$   $\mu$ m.



Tendo em vista que o dispositivo pode estar sujeito à diferentes situações, onde o fluxo de calor incidido e a temperatura inicial do sistema podem variar, procuramos observar a retificação térmica em função desses parâmetros. Os resultados encontrados mostraram que a retificação térmica do diodo independe do fluxo de calor e da temperatura inicial (Figura

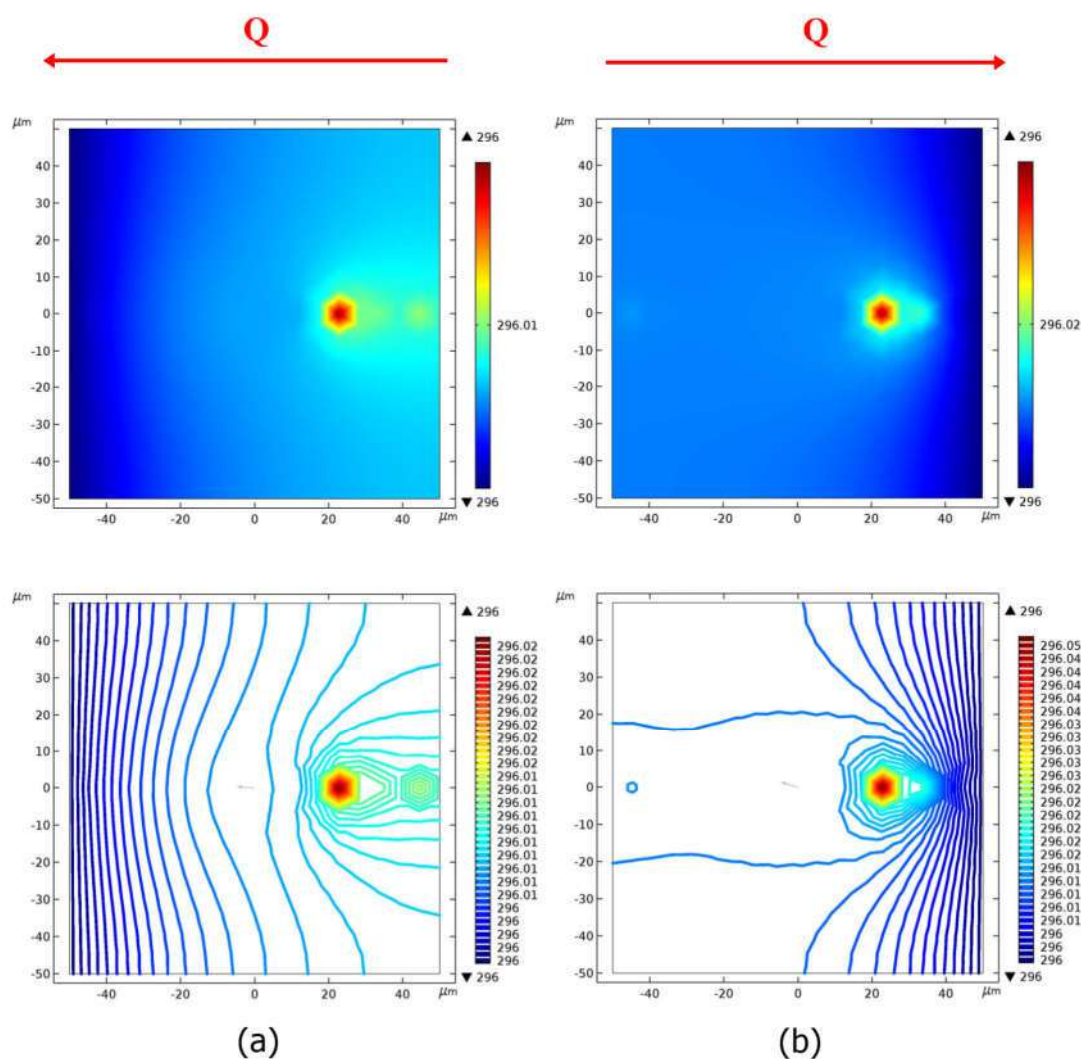
6.3). Isso decorre devido a métrica do defeito, como vemos na Equação (3.14), que não tem a temperatura explicitamente [96].

Figura 6.3: Retificação térmica em função da temperatura inicial. Os parâmetros usados foram magnitude do vetor de Burger  $b = 10 \mu\text{m}$  (vermelho),  $b = 15 \mu\text{m}$  (laranja) e  $b = 20 \mu\text{m}$  (amarelo), fluxo de calor de  $Q = 5 \text{ kW/m}^2$  e comprimento de  $L = 100 \mu\text{m}$ .



Na Figura 6.4 temos o mapeamento térmico com a influência da deslocação em aresta. Os parâmetros utilizados foram: fluxo de calor  $Q = 5 \text{ kW/m}^2$ , magnitude do vetor de Burger  $b = 10 \mu\text{m}$ , temperatura inicial  $T = 296 \text{ K}$  e comprimento  $L = 100 \mu\text{m}$ . A retificação térmica medida para esses parâmetros foi de aproximadamente 32%, resultado esse para o menor valor do intervalo da magnitude do vetor de Burger encontrado experimentalmente [2, 112]. É necessário uma análise adicional sobre os resultados para explicar o ponto quente visto na figura, onde suspeita-se está relacionado com uma curvatura efetivamente sentida pelo calor.

Figura 6.4: Mapeamento térmico de um cristal líquido esmético com efeito da deslocação em aresta; (a) fluxo de calor na direção  $-\hat{x}$  e (b) fluxo de calor na direção  $+\hat{x}$ . Os parâmetros usados foram fluxo de calor  $Q = 5 \text{ kW/m}^2$ , magnitude do vetor de Burger  $b = 10 \text{ }\mu\text{m}$ , temperatura inicial  $T = 296 \text{ K}$  e comprimento  $L = 100 \text{ }\mu\text{m}$ .

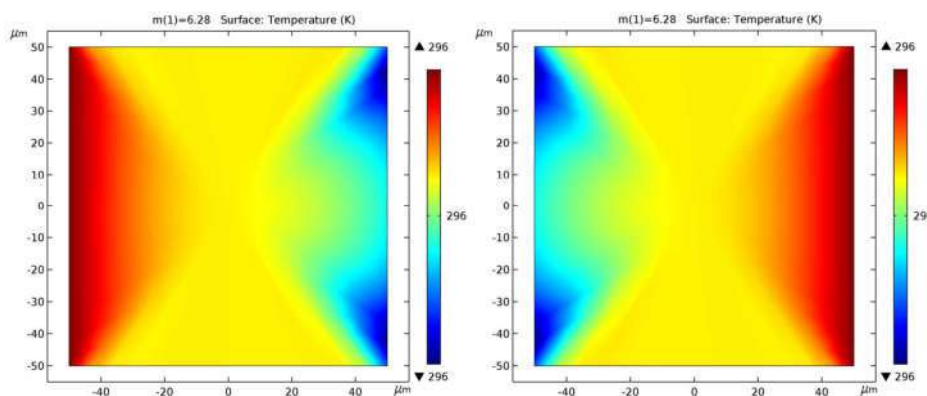


## 6.1 Verificação da independência do fluxo de calor e da temperatura inicial

Anteriormente, foram apresentadas duas métricas usadas como tensor condutividade térmica, sendo o tensor condutividade térmica (4.16) responsável pelos resultados apresentados previamente neste capítulo. Devido a independência da retificação em relação ao fluxo

de calor e a temperatura inicial, o tensor condutividade térmica (4.15) foi utilizado para verificar esse resultado. Dessa maneira, obtivemos o mapeamento térmico mostrado na Figura 6.5, onde temos a influência do par de desclinações, uma à uma distância  $h$  da outra. E como esperado, em consequência da temperatura não aparecer explicitamente nos dois tensores, (4.15) e (4.16), a retificação térmica do sistema não depende da temperatura inicial e do calor incidido.

Figura 6.5: Mapeamento térmico de um cristal líquido esmétrico com efeito da deslocação em aresta; fluxo de calor na direção  $+\hat{x}$  (esquerda) e fluxo de calor na direção  $-\hat{x}$  (direita). Os parâmetros usados foram fluxo de calor  $Q = 5 \text{ kW/m}^2$ , ângulo das desclinações  $m = 6,28 \text{ rad}$ , temperatura inicial  $T = 296 \text{ K}$  e comprimento  $L = 100 \text{ }\mu\text{m}$ .



Os resultados de interesse foram os da métrica (3.14), onde estamos bem longe do defeito e em dimensões e parâmetros acessíveis experimentalmente, como o a magnitude do vetor de Burger [2].

# Capítulo 7

## Conclusões

Na primeira parte do trabalho, nós vimos que um cristal líquido nemático 5CB, na presença de um defeito topológico chamado desclinação radial em escape confinado em um tubo capilar, pode retificar simultaneamente luz e calor. Resolvendo as equações de difusão, e de onda, pelo método dos elementos finitos, utilizando o COMSOL, para a desclinação na direção  $-\hat{z}$ , encontramos uma retificação variando entre 5% e 120% e vimos que a direção direta do diodo é na direção  $+\hat{z}$ . A explicação para tal é através do princípio de Fermat e da birrefringência positiva  $n_{\parallel} - n_{\perp}$ , fazendo com que as direções de frente do diodo sejam diferente para a luz e para o calor. Também obtivemos um aumento na retificação óptica quando: diminuimos o calor incidido e o raio do capilar; e aumentamos o comprimento e o ângulo de ancoramento. Com isso, podemos usar os parâmetros de radiação incidente  $1 V/m$ , fluxo de calor  $Q = 5 kW/m^2$  na direção  $-\hat{z}$ , raio  $R = 30 \mu m$ , comprimento  $H = 40 \mu m$ , ângulo de ancoragem  $\beta = 90^\circ$  e comprimento de onda  $\lambda = 50 \mu m$ , e obter uma retificação óptica de aproximadamente 120%.

O diodo multifísico de cristal líquido nemático proposto pode diminuir o uso de energia em diferentes ambientes como residências e indústrias. Assim como vimos uma nova utilidade dos cristais líquidos, além de aplicações em telas. O dispositivo também contribui com a economia de material, já que retifica simultaneamente calor e luz.

Na proposta do diodo térmico, vimos que o cristal líquido esmétrico na presença de uma deslocação em aresta, pode retificar calor. Utilizando a métrica que descreve a geometria

do defeito, resolvemos a equação de difusão pelo método dos elementos finitos, através do COMSOL, e vimos que a direção direta do diodo proposto é  $+\hat{x}$ . A explicação para esse efeito é que o surgimento de camadas aumenta a quantidade de material e facilita a propagação dos fônons. Essa influência das camadas pode ser vista na dependência direta da retificação, que chegou a aproximadamente 82%, em relação à magnitude do vetor de Burger. Entretanto, a retificação não sofreu mudança significativa para a variação da temperatura inicial e para a variação do fluxo de calor incidido. Isso pode estar ligado a temperatura não aparecer explicitamente na métrica do defeito, onde depois utilizamos outra métrica do mesmo defeito sob condições diferentes, e verificamos o mesmo fenômeno.

Para trabalhos futuros, uma possibilidade é estudar a retificação acústica para a desclinação radial em escape. Também podemos estudar o comportamento de películas com o diodo multifísico, podendo ser aplicadas em janelas de vidro. Outra alternativa também seria estudar o comportamento óptico e acústico da deslocação em aresta. Esses dispositivos podem dar início a uma nova geração de películas de vidro. Isto é devido os baixos custos iniciais e de manutenção que a tecnologia dos cristais líquidos tem. Além de rápido processo para chegar ao mercado proveniente da fabricação e altas taxas de aprendizagem para melhorias futuras.

# Referências Bibliográficas

- [1] Djair Melo, Ivna Fernandes, Fernando Moraes, Sébastien Fumeron, and Erms Pereira. Thermal diode made by nematic liquid crystal. *Physics Letters A*, 380(38):3121–3127, 2016.
- [2] PG De Gennes, J Prost, and R Pelcovits. The physics of liquid crystals. *Physics Today*, 48(5):67, 1995.
- [3] P Oswald and P Pieranski. Nematic and cholesteric liquid crystals: Concepts and physical properties illustrated by experiments (crc, boca raton, fl). 2005.
- [4] Cheng Tang, Hao-Fan Wang, Xiang Chen, Bo-Quan Li, Ting-Zheng Hou, Bingsen Zhang, Qiang Zhang, Maria-Magdalena Titirici, and Fei Wei. Topological defects in metal-free nanocarbon for oxygen electrocatalysis. *Advanced Materials*, 28(32):6845–6851, 2016.
- [5] J Carvalho, C Furtado, and F Moraes. Dirac oscillator interacting with a topological defect. *Physical Review A*, 84(3):032109, 2011.
- [6] Victor Vakaryuk. Stability of topological defects in chiral superconductors: London theory. *Physical Review B*, 84(21):214524, 2011.
- [7] Cleverson Filgueiras and Breno F de Oliveira. Electron on a cylinder with topological defects in a homogeneous magnetic field. *Annalen der Physik*, 523(11):898–909, 2011.
- [8] N Abu-Libdeh and D Venus. Dynamics of topological defects in a two-dimensional magnetic domain stripe pattern. *Physical Review B*, 84(9):094428, 2011.



- [9] Núria Petit-Garrido, Rahul P Trivedi, Jordi Ignés-Mullol, Josep Claret, Clayton La-pointe, Francesc Sagués, and Ivan I Smalyukh. Healing of defects at the interface of nematic liquid crystals and structured langmuir-blodgett monolayers. *Physical Review Letters*, 107(17):177801, 2011.
- [10] Hiroyasu Toyoki. Cell dynamics simulation for the phase ordering of nematic liquid crystals. *Physical Review E*, 47(4):2558, 1993.
- [11] Subhrajit Dutta and Soumen Kumar Roy. Dynamical scaling in two-dimensional quenched uniaxial nematic liquid crystals. *Physical Review E*, 71(2):026119, 2005.
- [12] Isaac Chuang, Ruth Durrer, Neil Turok, and Bernard Yurke. Cosmology in the laboratory: Defect dynamics in liquid crystals. *Science*, 251(4999):1336–1342, 1991.
- [13] Isaac Chuang, Neil Turok, and Bernard Yurke. Late-time coarsening dynamics in a nematic liquid crystal. *Physical Review Letters*, 66(19):2472, 1991.
- [14] BF De Oliveira, PP Avelino, F Moraes, and JCRE Oliveira. Nematic liquid crystal dynamics under applied electric fields. *Physical Review E*, 82(4):041707, 2010.
- [15] I Dierking, O Marshall, J Wright, and N Bulleid. Annihilation dynamics of umbilical defects in nematic liquid crystals under applied electric fields. *Physical Review E*, 71(6):061709, 2005.
- [16] Andrew Pargellis, Neil Turok, and Bernard Yurke. Monopole-antimonopole annihilation in a nematic liquid crystal. *Physical Review Letters*, 67(12):1570, 1991.
- [17] AN Pargellis, P Finn, JW Goodby, P Panizza, B Yurke, and PE Cladis. Defect dynamics and coarsening dynamics in smectic-c films. *Physical Review A*, 46(12):7765, 1992.
- [18] Martin Zapotocky, Paul M Goldbart, and Nigel Goldenfeld. Kinetics of phase ordering in uniaxial and biaxial nematic films. *Physical Review E*, 51(2):1216, 1995.
- [19] Martin Maldovan. Sound and heat revolutions in phononics. *Nature*, 503(7475):209, 2013.

- [20] Vladimir M Shalaev. Optical negative-index metamaterials. *Nature Photonics*, 1(1):41, 2007.
- [21] Huanyang Chen, Che Ting Chan, and Ping Sheng. Transformation optics and metamaterials. *Nature Materials*, 9(5):387, 2010.
- [22] Sebastien Guenneau, Claude Amra, and Denis Veynante. Transformation thermodynamics: cloaking and concentrating heat flux. *Optics Express*, 20(7):8207–8218, 2012.
- [23] CW Chang, D Okawa, A Majumdar, and A Zettl. Solid-state thermal rectifier. *Science*, 314(5802):1121–1124, 2006.
- [24] Da-Wei Wang, Hai-Tao Zhou, Miao-Jun Guo, Jun-Xiang Zhang, Jörg Evers, and Shi-Yao Zhu. Optical diode made from a moving photonic crystal. *Physical Review Letters*, 110(9):093901, 2013.
- [25] Olli-Pentti Saira, Matthias Meschke, Francesco Giazotto, Alexander M Savin, Mikko Möttönen, and Jukka P Pekola. Heat transistor: Demonstration of gate-controlled electronic refrigeration. *Physical Review Letters*, 99(2):027203, 2007.
- [26] Mehmet Fatih Yanik, Shanhui Fan, Marin Soljačić, and John D Joannopoulos. All-optical transistor action with bistable switching in a photonic crystal cross-waveguide geometry. *Optics Letters*, 28(24):2506–2508, 2003.
- [27] Nianbei Li, Jie Ren, Lei Wang, Gang Zhang, Peter Hänggi, and Baowen Li. Colloquium: Phononics: Manipulating heat flow with electronic analogs and beyond. *Reviews of Modern Physics*, 84(3):1045, 2012.
- [28] Viacheslav Kublytskyi, Svend-Age Biehs, and Philippe Ben-Abdallah. Radiative bistability and thermal memory. *Physical Review Letters*, 113(7):074301, 2014.
- [29] Katia Gallo, Gaetano Assanto, Krishnan R Parameswaran, and Martin M Fejer. All-optical diode in a periodically poled lithium niobate waveguide. *Applied Physics Letters*, 79(3):314–316, 2001.

- [30] Bo Peng, Şahin Kaya Özdemir, Fuchuan Lei, Faraz Monifi, Mariagiovanna Gianfreda, Gui Lu Long, Shanhui Fan, Franco Nori, Carl M Bender, and Lan Yang. Parity-time-symmetric whispering-gallery microcavities. *Nature Physics*, 10(5):394, 2014.
- [31] Filippo Fratini, Eduardo Mascarenhas, Laleh Safari, J-Ph Poizat, Daniel Valente, ALEXIA Auffèves, Dario Gerace, and MF Santos. Fabry-perot interferometer with quantum mirrors: nonlinear light transport and rectification. *Physical Review Letters*, 113(24):243601, 2014.
- [32] Chen Wang, Chang-Zhu Zhou, and Zhi-Yuan Li. On-chip optical diode based on silicon photonic crystal heterojunctions. *Optics Express*, 19(27):26948–26955, 2011.
- [33] C Dames. Solid-state thermal rectification with existing bulk materials. *Journal of Heat Transfer*, 131(6):061301, 2009.
- [34] Baowen Li, Lei Wang, and Giulio Casati. Thermal diode: Rectification of heat flux. *Physical Review Letters*, 93(18):184301, 2004.
- [35] Markus Schmotz, Judith Maier, Elke Scheer, and Paul Leiderer. A thermal diode using phonon rectification. *New Journal of Physics*, 13(11):113027, 2011.
- [36] Zhen Chen, Carlaton Wong, Sean Lubner, Shannon Yee, John Miller, Wanyoung Jang, Corey Hardin, Anthony Fong, Javier E Garay, and Chris Dames. A photon thermal diode. *Nature Communications*, 5:5446, 2014.
- [37] John Miller, Wanyoung Jang, and Chris Dames. Thermal rectification by ballistic phonons in asymmetric nanostructures. In *ASME 2009 Heat Transfer Summer Conference collocated with the InterPACK09 and 3rd Energy Sustainability Conferences*, pages 317–326. American Society of Mechanical Engineers, 2009.
- [38] Sílvio J Santos Jr, Jair Andrade, and Erms Pereira. Simultaneous rectification of heat and light using liquid crystal. *Journal of Applied Physics*, 124(9):094501, 2018.
- [39] F. Reinitzer. Beiträge zur kenntniss des cholesterins. *Monatsh. Chem*, 9:421–441, 1888.

- [40] Rud Virchow. Ueber eine im gehirn und rückenmark des menschen aufgefundene substanz mit der chemischen reaction der cellulose. *Archiv für pathologische Anatomie und Physiologie und für klinische Medicin*, 6(1):135–138, 1854.
- [41] C. Mettenheimer. Corresp. ver. gem. arb. förd. wiss. heilkd. *Monatsh. Chem*, 24:331, 1857.
- [42] W. Loebisch. Zur kenntniss des cholesterins. *Ber. Deutsch. Chem. Ges*, 5:510–514, 1872.
- [43] M. B. Rayman. *Bull. Soc. Chim. Paris*, 47:898, 1887.
- [44] Otto Lehmann. Über fließende krystalle. *Zeitschrift für physikalische Chemie*, 4(1):462–472, 1889.
- [45] Alexander G Petrov. *The lyotropic state of matter: molecular physics and living matter physics*. CRC Press, 2014.
- [46] James W McBain and William C Sierichs. The solubility of sodium and potassium soaps and the phase diagrams of aqueous potassium soaps. *Journal of the American Oil Chemists' Society*, 25(6):221–225, 1948.
- [47] Antônio M Figueiredo Neto and Silvio RA Salinas. *The physics of lyotropic liquid crystals: phase transitions and structural properties*, volume 62. Oxford University Press on Demand, 2005.
- [48] P Ekwall and L Mandell. Solutions of alkali soaps and water in fatty acids. *Kolloid-Zeitschrift und Zeitschrift für Polymere*, 233(1-2):938–944, 1969.
- [49] Vittorio Luzzati and PA Spegt. Polymorphism of lipids. *Nature*, 215(5102):701, 1967.
- [50] J Rogers and PA Winsor. Change in the optic sign of the lamellar phase (g) in the aerosol ot/water system with composition or temperature. *Journal of Colloid and Interface Science*, 30(2):247–257, 1969.
- [51] GW Gray. Synthesis and properties of side chain liquid crystal polysiloxanes. *Blackie and Son, Side Chain Liquid Crystal Polymers*,, pages 106–129, 1989.

- [52] G. Friedel. Les états mésomorphes de la matière. *Ann. Phys. (Paris)*, (18):272–474, 1922.
- [53] C. W. Oseen. The theory of liquid crystals. *Trans. Faraday Soc.*, 29:883–899, 1933.
- [54] H Zocher. The effect of a magnetic field on the nematic state. *Transactions of the Faraday Society*, 29(140):945–957, 1933.
- [55] Kenneth D Lawson and Thomas J Flautt. Magnetically oriented lyotropic liquid crystalline phases. *Journal of the American Chemical Society*, 89(21):5489–5491, 1967.
- [56] Ger Vertogen and Wim H de Jeu. *Thermotropic liquid crystals, fundamentals*, volume 45. Springer Science & Business Media, 2012.
- [57] Horst Stegemeyer. *Lyotrope Flüssigkristalle: Grundlagen Entwicklung Anwendung*. Springer-Verlag, 1999.
- [58] Norman H March and Mario P Tosi. *Polymers, liquid crystals, and low-dimensional solids*. Springer Science & Business Media, 2012.
- [59] Ingo Dierking. *Textures of liquid crystals*. John Wiley & Sons, 2003.
- [60] LJ Yu and Alfred Saupe. Observation of a biaxial nematic phase in potassium laurate-1-decanol-water mixtures. *Physical Review Letters*, 45(12):1000, 1980.
- [61] AM Figueiredo Neto, Y Galerne, AM Levelut, and L Liebert. Pseudo-lamellar ordering in uniaxial and biaxial lyotropic nematics: a synchrotron x-ray diffraction experiment. *Journal de Physique Lettres*, 46(11):499–505, 1985.
- [62] Iain W Stewart. *The static and dynamic continuum theory of liquid crystals*, volume 17. Taylor and Francis, London, 2004.
- [63] Michael J Stephen and Joseph P Straley. Physics of liquid crystals. *Reviews of Modern Physics*, 46(4):617, 1974.
- [64] DK Yang and ST Wu. *Fundamentals of liquid crystal devices* john wiley & sons, 2006.

- [65] Maurice Kleman and Oleg D Lavrentovich. *Soft matter physics: an introduction*. Springer Science & Business Media, 2007.
- [66] Fernando Ely, MHMO Hamanaka, and Alaide Pellegrini Mammana. Cristais líquidos colestéricos: a quiralidade revela as suas cores. *Química Nova*, 30(7):1776, 2007.
- [67] Rafael Leite Rubim. Estudo de interações entre membranas lipídicas por experimentos de saxs: o efeito da composição. *Dissertação de Mestrado, IFUSP/SP*, 2012.
- [68] Júlio César Borges. Aula de bioquímica avançada: Micelas, membranas e transporte. <<https://bit.ly/2QVxqOG>>. Acesso em: 10-01-2019.
- [69] Peter J Wojtowicz, Ping Sheng, and EB Priestley. *Introduction to liquid crystals*. Springer, 1975.
- [70] CJ Pethick and A Yu Potekhin. Liquid crystals in the mantles of neutron stars. *Physics Letters B*, 427(1-2):7–12, 1998.
- [71] Mark J Bowick, L Chandar, Eric A Schiff, and Ajit M Srivastava. The cosmological kibble mechanism in the laboratory: string formation in liquid crystals. *Science*, 263(5149):943–945, 1994.
- [72] H Mukai, PRG Fernandes, BF De Oliveira, and GS Dias. Defect-antidefect correlations in a lyotropic liquid crystal from a cosmological point of view. *Physical Review E*, 75(6):061704, 2007.
- [73] Erms Rodrigues Pereira. Física dos cristais líquidos e gravitação: pontos de encontro. *Tese de Doutorado, UFPB*, 2011.
- [74] B Yurke, AN Pargellis, T Kovacs, and DA Huse. Coarsening dynamics of the xy model. *Physical Review E*, 47(3):1525, 1993.
- [75] Erms Pereira and Fernando Moraes. Diffraction of light by topological defects in liquid crystals. *Liquid Crystals*, 38(3):295–302, 2011.

- [76] Sébastien Fumeron, Erms Pereira, and Fernando Moraes. Modeling heat conduction in the presence of a dislocation. *International Journal of Thermal Sciences*, 67:64–71, 2013.
- [77] Djair Ferreira Almeida de Melo et al. Proposta de um diodo térmico feito de cristal líquido nemático. *Dissertação de Mestrado, Universidade Federal de Alagoas*, 2015.
- [78] Renato Ribeiro Guimarães. Investigação da dinâmica de defeitos topológicos em sistema líquido-cristalino. *Dissertação de Mestrado, Universidade Estadual de Maringá, Maringá*, 2012.
- [79] PA De Castro, AJ Palangana, and LR Evangelista. Micellar shape anisotropy and elastic constants in discotic lyotropic liquid crystals. *Physical Review E*, 60(5):6195, 1999.
- [80] M Simões, AJ Palangana, LR Evangelista, WS Braga, and FS Alves. Bend and splay elastic constants at a reentrant isotropic–calamitic-nematic phase transition. *Physical Review E*, 72(3):031707, 2005.
- [81] Jerzy Kędzierski, Zbigniew Raszewski, Edward Nowinowski-Kruszelnicki, Marek Andrzej Kojdecki, Wiktor Piecek, Paweł Perkowski, and Emilia Miszczyk. Composite method for measurement of splay, twist and bend nematic elastic constants by use of single special in-plane-switched cell. *Molecular Crystals and Liquid Crystals*, 544(1):57–1045, 2011.
- [82] PE Cladis and M Kleman. Non-singular disclinations of strength  $s = \pm 1$  in nematics. *Journal de Physique*, 33(5-6):591–598, 1972.
- [83] Alfred Saupe. Disclinations and properties of the directorfield in nematic and cholesteric liquid crystals. *Molecular Crystals and Liquid Crystals*, 21(3-4):211–238, 1973.
- [84] Robert B Meyer. On the existence of even indexed disclinations in nematic liquid crystals. *Philosophical Magazine*, 27(2):405–424, 1973.
- [85] Maurice Kléman. Points, lines and walls in liquid crystals, magnetic systems and various ordered media. *John Wiley and Sons, xxx+ 322, 23 x 15 cm, illustrated*, 1982.

- [86] GP Crawford, M Vilfan, JW Doane, and I Vilfan. Escaped-radial nematic configuration in submicrometer-size cylindrical cavities: Deuterium nuclear-magnetic-resonance study. *Physical Review A*, 43(2):835, 1991.
- [87] GP Crawford, David W Allender, J William Doane, M Vilfan, and I Vilfan. Finite molecular anchoring in the escaped-radial nematic configuration: A nmr 2 study. *Physical Review A*, 44(4):2570, 1991.
- [88] Igor Vilfan, Marija Vilfan, and Slobodan Žumer. Defect structures of nematic liquid crystals in cylindrical cavities. *Physical Review A*, 43(12):6875, 1991.
- [89] David W Allender, GP Crawford, and JW Doane. Determination of the liquid-crystal surface elastic constant  $k_{24}$ . *Physical Review Letters*, 67(11):1442, 1991.
- [90] GP Crawford, David W Allender, and JW Doane. Surface elastic and molecular-anchoring properties of nematic liquid crystals confined to cylindrical cavities. *Physical Review A*, 45(12):8693, 1992.
- [91] Nasser Mohieddin Abukhdeir and Alejandro D Rey. Edge dislocation core structure in lamellar smectic-a liquid crystals. *Soft Matter*, 6(6):1117–1120, 2010.
- [92] Randall D Kamien and Ricardo A Mosna. The topology of dislocations in smectic liquid crystals. *New Journal of Physics*, 18(5):053012, 2016.
- [93] RB Meyer, B Stebler, and ST Lagerwall. Observation of edge dislocations in smectic liquid crystals. *Physical Review Letters*, 41(20):1393, 1978.
- [94] Peter S Pershan. Dislocation effects in smectic-a liquid crystals. *Journal of Applied Physics*, 45(4):1590–1604, 1974.
- [95] Peter S Pershan and J Prost. Dislocation and impurity effects in smectic-a liquid crystals. *Journal of Applied Physics*, 46(6):2343–2353, 1975.
- [96] Fernando Moraes. Geodesics around a dislocation. *Physics Letters A*, 214(3-4):189–192, 1996.



- [97] José Guilherme Silva, Sébastien Fumeron, Fernando Moraes, and Erms Pereira. High thermal rectifications using liquid crystals confined into a conical frustum. *Brazilian Journal of Physics*, pages 1–7, 2018.
- [98] Sébastien Fumeron, E Pereira, and F Moraes. Principles of thermal design with nematic liquid crystals. *Physical Review E*, 89(2):020501, 2014.
- [99] Sébastien Fumeron, Fernando Moraes, and Erms Pereira. Thermal and shape topological robustness of heat switchers using nematic liquid crystals. *The European Physical Journal E*, 41(2):16, 2018.
- [100] Erms R Pereira and Fernando Moraes. Flowing liquid crystal simulating the schwarzschild metric. *Central European Journal of Physics*, 9(4):1100–1105, 2011.
- [101] Sébastien Fumeron, Bertrand Berche, Fernando Santos, Erms Pereira, and Fernando Moraes. Optics near a hyperbolic defect. *Physical Review A*, 92(6):063806, 2015.
- [102] Sébastien Fumeron, Erms Pereira, and Fernando Moraes. Generation of optical vorticity from topological defects. *Physica B: Condensed Matter*, 476:19–23, 2015.
- [103] Sébastien Fumeron, Fernando Moraes, and Erms Pereira. Retrieving the saddle-splay elastic constant  $k_{24}$  of nematic liquid crystals from an algebraic approach. *The European Physical Journal E*, 39(9):83, 2016.
- [104] Charles W Misner, Kip S Thorne, John Archibald Wheeler, and David I Kaiser. *Gravitation*. Princeton University Press, 2017.
- [105] Jun Li, Sebastian Gauza, and Shin-Tson Wu. Temperature effect on liquid crystal refractive indices. *Journal of applied physics*, 96(1):19–24, 2004.
- [106] Guenter Ahlers, David S Cannell, Lars Inge Berge, and Shinichi Sakurai. Thermal conductivity of the nematic liquid crystal 4-n-pentyl-4'-cyanobiphenyl. *Physical Review E*, 49(1):545, 1994.
- [107] MO Katanaev and IV Volovich. Theory of defects in solids and three-dimensional gravity. *Annals of Physics*, 216(1):1–28, 1992.

- [108] Gang Wu and Baowen Li. Thermal rectification in carbon nanotube intramolecular junctions: Molecular dynamics calculations. *Physical Review B*, 76(8):085424, 2007.
- [109] He Tian, Dan Xie, Yi Yang, Tian-Ling Ren, Gang Zhang, Yu-Feng Wang, Chang-Jian Zhou, Ping-Gang Peng, Li-Gang Wang, and Li-Tian Liu. A novel solid-state thermal rectifier based on reduced graphene oxide. *Scientific Reports*, 2:523, 2012.
- [110] HA Ragheb, A Sebak, and L Shafai. Cutoff frequencies of circular waveguide loaded with eccentric dielectric cylinder. *IEE Proceedings-Microwaves, Antennas and Propagation*, 144(1):7–12, 1997.
- [111] Antonio Fornieri, María José Martínez-Pérez, and Francesco Giazotto. A normal metal tunnel-junction heat diode. *Applied Physics Letters*, 104(18):183108, 2014.
- [112] F Nallet and J Prost. Edge dislocation arrays in swollen lamellar phases. *EPL (Europhysics Letters)*, 4(3):307, 1987.