



**MINISTÉRIO DA EDUCAÇÃO E CULTURA – MEC**  
**UNIVERSIDADE FEDERAL DO PIAUÍ – UFPI**  
**PRÓ-REITORIA DE PESQUISA E PÓS-GRADUAÇÃO – PRPPG**  
**Coordenadoria Geral de Pesquisa – CGP**  
*Campus Universitário Ministro Petrônio Portela, Bloco 06 – Bairro Ininga*  
*Cep: 64049-550 – Teresina-PI – Brasil – Fone (86) 215-5564 – Fone/Fax (86) 215-5560*  
E-mail: pesquisa@ufpi.br; pesquisa@ufpi.edu.br

## **Estudo das Fases dos Cristais Líquidos Colestéricos Usando Modelos de Spins**

*Eduardo dos Santos Nascimento (bolsista do PIBIC/CNPq), José Pimentel de Lima (Orientador, Depto de Física – UFPI)*

### 1. Introdução

Atualmente uma das áreas mais ativas e interdisciplinares de pesquisa em física é a Física da Matéria Mole (Soft Matter Physics), que, geralmente, está associada ao estudo das propriedades de materiais conhecidos como fluidos complexos[1]. Tais materiais tem como características principais a complexidade e a flexibilidade. O interesse nesses materiais vai desde questões relacionadas com física básica (como transições de fase e forças intermoleculares) até as aplicações tecnológicas (indústria alimentícia, lubrificantes, cosméticos, displays, etc).

Geralmente, a abordagem teórica adotada no estudo das fases e transições de fases em cristais líquidos é a fenomenológica. Estamos propondo uma outra maneira de atacar o problema: modelos de spins. Nosso interesse foi estudar as fases colestéricas[2] a partir de um mapeamento em modelos microscópicos que servem para o entendimento de fases moduladas[3]. Entre os modelos estudados estão o modelo do relógio quiral de três estados e o modelo ANNNI[4].

O modelo do relógio quiral de três estados é o modelo de spins mais simples que apresenta modulação na função de correlação e exibe uma degenerescência no estado fundamental. O modelo ANNNI foi um dos primeiros modelos introduzidas para o estudo de fases moduladas e apresenta um diagrama de fases rico e complexo.

Acreditamos que possamos estudar as fases colestéricas dos cristais líquidos através de um mapeamento em um desses modelos, a fim de simular dos diversos passos das fases colestéricas.

### 2. Metodologia

2.1 Estudamos modelos de spins utilizados para a descrição de fases moduladas espacialmente.

2.2 Usando teoria de campo efetivo, determinamos o funcional da energia livre para o modelo ANNNI.

2.3 Levantamos o diagrama de fases, identificando todas as fases do sistema.

### 3. Resultados e Discussão

Consideramos o modelo ANNNI numa rede cúbica tridimensional definido pelo Hamiltoniano

$$\mathcal{H} = - \sum_{\alpha,z} \left( J_0 \sigma_{\alpha,z} \sigma_{\alpha+1,z} + J_1 \sigma_{\alpha,z} \sigma_{\alpha,z+1} + J_2 \sigma_{\alpha,z} \sigma_{\alpha,z+2} \right)$$

onde  $\sigma_{\alpha,z}$  é uma variável de spin, associada ao sítio  $\alpha$  da camada  $z$ , e pode assumir os valores +1 e -1. No contexto de campos efetivos, a energia livre efetiva é dada por

$$N^{-3} G_{mf}(\beta, \{\eta_z\}, N) = -\frac{1}{\beta} \log 2 + \frac{1}{2N\beta} \sum_z \left[ (1 + m_z) \log(1 + m_z) + (1 - m_z) \log(1 - m_z) \right] - \frac{1}{2N} \sum_z \eta_z m_z$$

onde os campos efetivos são

$$\eta_z = 4J_0 m_z + J_1(m_{z-1} + m_{z+1}) + J_2(m_{z-2} + m_{z+2})$$

com

$$m_z = \tanh \beta \left[ 4J_0 m_z + J_1(m_{z-1} + m_{z+1}) + J_2(m_{z-2} + m_{z+2}) \right]$$

sendo a magnetização associada a camada  $z$ .

Os estados termodinamicamente estáveis são aqueles dados pelo conjunto  $\{m_z\}$  de equações acopladas que minimizam a energia livre efetiva do sistema. Com isso, construímos o diagrama de fases do modelo, apresentado na Figura 1 [5]. As principais fases comensuráveis são exibidas do diagrama e representadas por  $\langle \rangle$ . Também são apresentadas as fases ferromagnética(FERRO) e paramagnética(PARA).

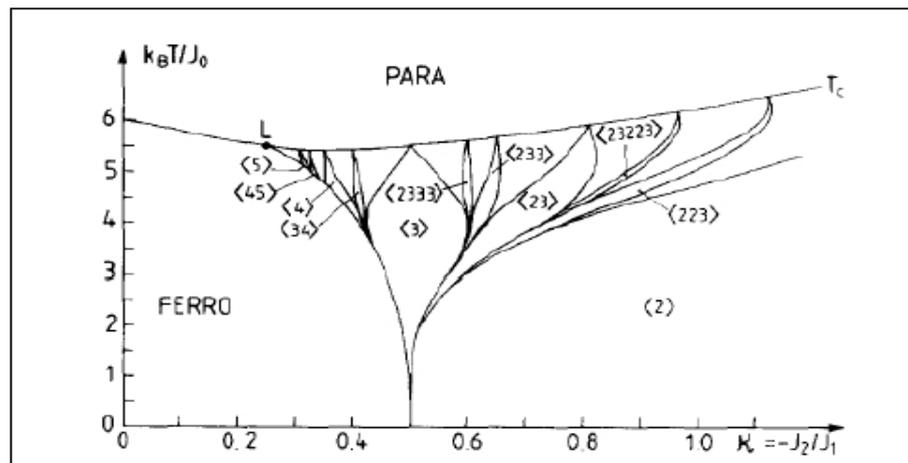


Figura 1

#### 4. Conclusão

Existem vários modelos microscópicos para descrever materiais que são capazes de produzir fases moduladas. Apresentamos um desses modelos: o modelo ANNNI. Descrevemos a aplicação do método de campo efetivo no modelo ANNNI e exibimos um diagrama de fases do mesmo. A topologia do diagrama de fases é rica, exibindo fases ferromagnética, paramagnética e algumas fases moduladas comensuráveis. Isso nos permitirá mapear um modelo de cristais líquidos com quiralidade em um dos modelos de spins[3], a fim de estudar e entender as estruturas moduladas que esses materiais apresentam.

#### 5. Apoio

Agradecemos à UFPI pelo apoio financeiro e estrutural disponibilizados.

#### 6. Referências Bibliográficas

[1] de Gennes, P. G. Soft Matter. Rev. Mod. Phys. 64, 645-648 (1992)

[2] de Gennes, P. G.; Prost, J. The Physics of Liquid Crystals, Oxford University Press (1993)

[3] Neubert B, Pleimling M, Siems R. Models for the description of uniaxially modulated materials. Ferroelectrics 208 , 141-190 (1998).

[4] Selke, W., Duxbury, P. M. The mean field-theory of the 3-dimensional ANNNI model. Z. Phys. B 57, 49-58 (1984).