



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

Programa de Pós-Graduação em Física Aplicada

Película Multifísica retificadora à base de Cristal Líquido  
Nemático para aplicação sobre vidros

*Vinícius Fernando da Silva*

Dissertação de Mestrado

Recife - PE

Janeiro de 2021

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

*Vinícius Fernando da Silva*

**Película Multifísica retificadora à base de Cristal Líquido Nemático  
para aplicação sobre vidros**

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**

**Coorientador: Dr. Fernando Jorge Sampaio Moraes**

**Recife - PE  
Janeiro de 2021**

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

-

**Vinícius Fernando da Silva**

Dissertação julgada adequada para obtenção do título de mestre em Física, defendida e APROVADA por unanimidade em 27/01/2021 pela Comissão Examinadora.

Orientador:

---

Prof. Dr. Erms Rodrigues Pereira  
SEDE - UFRPE

Coorientador:

---

Prof. Dr. Fernando Jorge Sampaio Moraes  
SEDE - UFRPE

Banca Examinadora:

---

Prof. Dr. Diego José Rátiva Millán  
SEDE - UFRPE

---

Prof. Dr. Jornandes Dias da Silva  
POLI - UPE

*"O que sabemos é uma gota, o que ignoramos é um oceano."*

*(Isaac Newton)*

Dedico esta, a amigos e familiares.

---

# AGRADECIMENTOS

Agradeço imensamente à minha família pelo apoio e confiança que sempre me deram. Minha mãe Neide, junto ao meu pai Josenildo, pelos constantes incentivos ao estudo e a minha irmã Priscila pelas guloseimas preparadas.

Agradeço imensamente também ao meu orientador Prof. Dr. Erms Rodrigues Pereira, que de forma ilustre e imprescindível, foi de essencial contribuição para minha formação no fim da graduação e durante todo o mestrado. Também um grande agradecimento aos professores Prof. Dr. Pedro Hugo de Figueiredo, Prof. Dr. Adauto José Ferreira de Souza, Prof. Dr. Ailton Fernandes de Macedo Junior, Prof. Dr. Fernando Jorge Sampaio Moraes, Prof. Dr. Michael Lee Sundheimer, Profa. Dra. Sara Cristina Pinto Rodrigues, Prof. Dr. Jairo Ricardo Rocha de Oliveira 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 para minha formação.

Agradeço a minha gata Lilith que me pedia comida, fazendo com que eu pausasse a escrita por alguns instantes, e me fez companhia durante a pandemia.

Aos amigos da batalha ao desbravar o Jackson e Sakurai, Ancelmo Júnior, Franklin Ferreira, (Cachorrão) Helder e Weslla Albuquerque. Aos colegas que compartilhamos momentos de descontração na sala da Pós-Graduação, , João Chakrian, Diego (Leitinho) Marcos Gabriel, Djardiel, Marconi, Josival, Igor e demais. Aos amigos de sempre da graduação que trilharam também esse caminho longo e tortuoso, Eduardo Tributino, Ícaro, Italo, Luiz Gustavo, Mariana, Josafary, Rhimon, Caio e Isabella. Aos irmãos de pesquisa, Lidiane Souza, Guilherme Sousa, Jair, Eduardo Viana, Vitor, Wallysson e Sílvio. E é claro aos amigos e colegas da IniciativaAlcoolizadores que fazem da sexta um dia melhor no Conterrâneo/Recife Antigo, (Jon Snow) Matheus, (gbike90) Guilherme Borges, Tchiara, Jéssica, Ylanna, Caroline, (Mamão) Erike, (Hobbit), Everton, Ewerton, Inês, Stephany, João Gordo, Natália, (Vegano) João Victor, e por fim aos amigos e colegas PETianos e do PVI.

E por fim agradeço também a CAPES pelo suporte financeiro.

---

# RESUMO

Na atualidade, a fonônica, que objetiva desenvolver análogos térmicos de componentes eletrônicos usuais (substituir o transporte de carga elétrica por calor), virou um assunto importante dada a necessidade de uma melhor utilização dos recursos energéticos, uma vez que a demanda do planeta só aumenta. A detecção e o tratamento de sinais térmicos e ópticos são cruciais para várias aplicações. Entretanto, alguns dos materiais utilizados (estruturas de grafeno e nanotubos de carbono, por exemplo) tem custo elevado e dependem de supercomputadores para uso de técnicas complexas. Outros materiais com um custo mais baixo apresentam resultados semelhantes.

Neste trabalho, nós mostramos um dispositivo, uma película, que retifica simultaneamente calor e luz. A película multifísica retificadora consiste em vários diodos confinados em um recipiente de borossilicato, os diodos por sua vez são em formato de tronco de cone preenchidos com um material alternativo, o cristal líquido nemático 5CB, com uma desclinação por escape radial (defeito com assimetria por inversão translacional ao longo do eixo que surge espontaneamente em cavidades cilíndricas). Com o vetor diretor obtemos o tensor de condutividade térmica e tensor permissividade dielétrica para cada diodo de 5CB. Uma vez definida a direção do fluxo de calor, resolvemos as equações de Fourier e Laplace para obter o campo espacial de temperatura e as equações de onda eletromagnética utilizando um

software de análise de elementos finitos.

Assim obtemos numericamente retificações térmicas e ópticas, respectivamente, 31 % e 1057 %, semelhante a diodos térmicos de nanotubo de carbono e diodos ópticos baseados em cristais fotônicos. Acreditamos que a película proposta pode contribuir na economia de material retificador, na miniaturização de sistemas complexos, desenvolver novos dispositivos estruturados, além de ser um uso alternativo dos cristais líquidos em dispositivos non-display, com aplicação no controle do fluxo de calor e luz através das superfícies.

**Palavras-chave:** Cristal líquido nemático, desclinação por escape radial, efeito de retificação.

---

# ABSTRACT

Nowadays, phononics, which aims to develop thermal analogues of usual electronic components (replacing the transport of electrical charge with heat), has become an important issue given the need for a better use of energy resources, since the planet's demand only increases. The detection and treatment of thermal and optical signals are crucial for various applications. However, some of the materials used (graphene structures and carbon nanotubes, for example) are expensive and depend on supercomputers to use complex techniques. Other materials with a lower cost show similar results.

In this work, we show a device, a film, that simultaneously rectifies heat and light. The multiphysical rectifier film consists of several diodes confined in a borosilicate container, the diodes in turn are shaped like a conical frustum tubes with an alternative material, the 5CB nematic liquid crystal, with a radial escape disclination (defect with asymmetry by translational inversion along the axis that spontaneously appears in cylindrical cavities). With the director vector we obtain the conductivity tensor thermal and tensor dielectric permittivity for each 5CB diode. Once the direction of the heat flow is defined, we solve the Fourier and Laplace equations to obtain the spatial temperature field and the electromagnetic wave equations using finite element analysis software.

Thus, we obtain numerically thermal and optical rectifications, respectively, 31 % and 1057 %, similar to carbon nanotube thermal diodes and optical diodes based on photonic crystals. We believe that the proposed film can contribute to the economy of rectifying material, in the miniaturization of complex systems, to develop new structured devices, in addition to being an alternative use of liquid crystals in non-display devices, with application in controlling the flow of heat and light through surfaces.

**Keywords:** Nematic liquid crystal, radial escape desclination, rectification effect.

---

# SUMÁRIO

<b>1</b>	<b>Introdução</b>	<b>1</b>
1.1	Motivação . . . . .	1
1.2	Problemas propostos . . . . .	2
1.3	Objetivos . . . . .	2
1.3.1	Objetivos Gerais . . . . .	2
1.3.2	Objetivos Específicos . . . . .	2
1.4	Metodologia . . . . .	3
1.5	Estrutura do trabalho . . . . .	5
<b>2</b>	<b>Fundamentação Teórica</b>	<b>6</b>
2.1	Cristais Líquidos: sólido ou líquido? . . . . .	6
2.2	As Mesofases . . . . .	7
2.2.1	Nemática . . . . .	7
2.2.2	Colestérica . . . . .	9
2.2.3	Esmética . . . . .	10
2.3	Parâmetro indutor de fase . . . . .	10
2.3.1	Termotrópico . . . . .	11

2.3.2	Liotrópico . . . . .	11
2.4	Desclinação por escape radial . . . . .	12
2.5	Ancoramento . . . . .	14
2.6	Propagação Anisotrópica . . . . .	15
2.7	Propriedades térmicas . . . . .	16
2.8	Propriedades dielétricas . . . . .	18
2.9	Diodo multifísico à base de Cristal Líquido Nemático . . . . .	19
2.10	Película multifísica à base de Cristal Líquido Nemático . . . . .	21
<b>3</b>	<b>Resultados e Discussões</b>	<b>24</b>
3.1	Introdução . . . . .	24
3.2	Retificação Térmica . . . . .	25
3.3	Retificação Multifísica . . . . .	30
<b>4</b>	<b>Conclusão</b>	<b>35</b>
<b>A</b>	<b>Lista de Variáveis</b>	<b>37</b>
	<b>Referências</b>	<b>45</b>

---

# LISTA DE FIGURAS

1.1	Organização ilustrativa das moléculas de um cristal líquido nemático. Observa-se que o diretor $\hat{n}$ representa a direção média das moléculas da amostra [1]. (Oswald e Pieranski, 2005) . . . . .	3
2.1	Implicação do aumento da temperatura na influência do ordenamento molecular sob o vetor diretor $\hat{n}$ apresentando as fases cristalina, nemática e líquido isotrópico. As moléculas da figura apresentam formato calamítico [2]. . . . .	7
2.2	Moléculas nemáticas com eixo orientacional uniaxial [3]. (Carvalho, 2010) . . . . .	8
2.3	Moléculas nemáticas com eixo orientacional biaxial [3]. (Carvalho, 2010) . . . . .	8
2.4	Estrutura do ordenamento da mesofase colestérica. Em destaque, o meio-passo de Hélice, indicando o parâmetro de espiral em torno de um eixo fixo, ou eixo helicoidal. Cada agrupamento de moléculas possui ordenamento em torno do vetor diretor de cada camada [4]. (Ely, 2007) . . . . .	9
2.5	Organização ilustrativa das moléculas de um cristal líquido esmétrico-A com constituintes elipsoidais [3]. (Carvalho, 2010) . . . . .	11
2.6	Esquema ilustrativo de cristais líquidos liotrópicos representados por moléculas anfífilas solúveis em água [2]. (Melo, 2015) . . . . .	12

2.7	Visualização em 3D de moléculas do tipo bastão formando uma desclinação radial com escape na direção $-\hat{z}$ em um tubo capilar (não mostrado) com raio $R = 30 \mu m$ e altura $H = 100 \mu m$ [5]. (Melo et. al, 2016) . . . . .	13
2.8	Tipos de ancoramento constatadas por moléculas de cristal líquido na superfície de uma estrutura: (a) Homeotrópico, (b) inclinado, (c) planar [6]. . . . .	14
2.9	Representação do diodo multifísico com geometria cilíndrica. Visão axial do tubo capilar confinando a desclinação de escape radial na direção $-\hat{z}$ . Para os resultados de Melo [5] et. al, a direção direta térmica do diodo é na direção da desclinação radial em escape, enquanto que no trabalho de Santos et. al [7] e Andrade [8] direção direta óptica é na direção $+\hat{z}$ . (Santos et. al, 2018)	20
2.10	Representação de um diodo único com geometria tronco de cone numa caixa. Tamanho da caixa: $150 \mu m \times 150 \mu m \times 35 \mu m$ , Raio maior $R = 75 \mu m$ e razão entre os raios $R_r = 0,5$ . . . . .	21
2.11	Representação dos 25 diodos multifísicos numa caixa de borossilicato formando a película. . . . .	22
2.12	Visão lateral de 25 diodos multifísicos numa caixa de borossilicato formando a película. Indicação do sentido fluxo de calor e sentido da onda eletromagnética plana utilizado para as simulações. . . . .	23
3.1	Superfícies isotérmicas de uma película retificadora térmica de borossilicato contendo 25 diodos à base de cristal líquido nemático (5CB). A película é um quadrado de $750 \mu m$ com $100 \mu m$ de altura. Os outros parâmetros são fluxo de calor $Q = 5 \text{ kW}/m^2$ , temperatura inicial $T_0 = 296 \text{ K}$ , raio maior do tronco de cone $R_l = 75 \mu m$ , razão entre o raios $R_r = 0,5$ , altura $H = 100 \mu m$ e ângulo de ancoragem $\chi_0 = 60^\circ$ . Para esses parâmetros, a retificação é de cerca de 17%.	25
3.2	Retificação versus Temperatura inicial $T_0$ para um fluxo de calor $Q = 5 \text{ kW}/m^2$ . Os parâmetros utilizados nessa simulação foram: altura $H = 35 \mu m$ , razão entre os raios $R_r = 0.5$ , raio maior $R_l = 75 \mu m$ e ângulo de ancoramento $\chi_0 = 60^\circ$ . . . . .	26

3.3	Retificação versus fluxo térmico $Q$ para uma temperatura inicial $T_0 = 296$ K. Os parâmetros utilizados nessa simulação foram: altura $H = 35 \mu m$ , razão entre os raios $R_r = 0.5$ , raio maior $R_l = 75 \mu m$ e ângulo de ancoramento $\chi_0 = 60^\circ$ . . . . .	27
3.4	Retificação versus diferentes valores de razão entre os raios $R_r = \frac{R_{menor}}{R_{maior}}$ do tronco de cone. Os parâmetros utilizados nessa simulação foram: altura $H = 35 \mu m$ , raio maior $R_l = 75 \mu m$ , ângulo de ancoramento $\chi_0 = 60^\circ$ e fluxo de calor $Q = 5 \text{ kW}/m^2$ . . . . .	28
3.5	Retificação versus diferentes alturas $H$ . Os parâmetros utilizados nessa simulação foram: razão entre os raios $R_r = 0.5$ , raio maior $R_l = 75 \mu m$ , ângulo de ancoramento $\chi_0 = 60^\circ$ e fluxo de calor $Q = 5 \text{ kW}/m^2$ . . . . .	29
3.6	Retificação versus número de diodos, para um diodo em uma caixa de $150 \mu m \times 150 \mu m \times 35 \mu m$ até 25 diodos em uma caixa de $750 \mu m \times 750 \mu m \times 35 \mu m$ . Os outros parâmetros são fluxo de calor $Q = 5 \text{ kW}/m^2$ , temperatura inicial $T_0 = 296$ K, raio maior do tronco de cone $R_l = 75 \mu m$ , razão entre os raios $R_r = 0,5$ , altura $H = 35 \mu m$ e ângulo de ancoragem $\chi_0 = 60^\circ$ . . . . .	30
3.7	Retificação versus diferentes valores de razão entre os raios ( $\frac{r}{R}$ ) de uma película de diodos em formato tronco de cone confinando um cristal líquido nemático (5CB) na configuração de desclinação por escape radial. Os parâmetros utilizados nessa simulação foram: raio maior $R_l = 75 \mu m$ , altura $H = 35 \mu m$ , comprimento de onda $\lambda = 50 \mu m$ , ângulo de ancoramento $\chi_0 = 60^\circ$ , fluxo de calor $Q = 5 \text{ kW}/m^2$ e intensidade de campo elétrico $E = 1 \text{ V}/m$ . . .	31
3.8	Retificação versus Altura para diferentes valores de altura $H$ de uma película de diodos em formato tronco de cone confinando um cristal líquido nemático (5CB) na configuração de desclinação por escape radial. Os parâmetros utilizados nessa simulação foram: raio maior $R_l = 75 \mu m$ , Razão entre os raios $R_r = 0.5$ , comprimento de onda $\lambda = 90 \mu m$ , ângulo de ancoramento $\chi_0 = 60^\circ$ , fluxo de calor $Q = 5 \text{ kW}/m^2$ e intensidade de campo elétrico $E = 1 \text{ V}/m$ . . .	32

- 3.9 Retificação versus raio maior para diferentes valores de raio maior  $R_l$  de uma película de diodos em formato tronco de cone confinando um cristal líquido nemático (5CB) na configuração de desclinação por escape radial. Os parâmetros utilizados nessa simulação foram: razão entre os raios  $R_r = 0.5$ , comprimento de onda  $\lambda = 50 \mu m$ , ângulo de ancoramento  $\chi_0 = 60^\circ$ , fluxo de calor  $Q = 5 kW/m^2$  e intensidade de campo elétrico  $E = 1 V/m$ . . . . . 33
- 3.10 Retificação versus comprimento de onda para diferentes valores de comprimento de onda  $\lambda$  de uma película de diodos em formato tronco de cone confinando um cristal líquido nemático (5CB) na configuração de desclinação por escape radial. Os parâmetros utilizados nessa simulação foram: raio maior  $R_l = 75 \mu m$ , razão entre os raios  $R_r = 0.5$ , ângulo de ancoramento  $\chi_0 = 60^\circ$ , fluxo de calor  $Q = 5 kW/m^2$  e intensidade de campo elétrico  $E = 1 V/m$ . . . 34

---

---

# CAPÍTULO 1

---

## INTRODUÇÃO

### 1.1 Motivação

A manipulação de diferentes formas de energia, como luz e calor, é de grande importância nas áreas tecnológicas e também econômica. Um caminho próspero nessa manipulação é o uso de micro e nanoestruturas de metamateriais [9, 10], que possuem fenômenos físicos que podem ser descritos por um processo óptico [11] ou um processo termodinâmico [12]. Com esses materiais é possível projetar e criar vários dispositivos como: diodos térmicos e ópticos [13, 14], transistores térmicos e ópticos [15–17], memória térmica e óptica [10, 18], ou ainda concentração e divergência entre outros efeitos de feixes eletromagnéticos usando uma estrutura cônica [19].

Usando diferentes mecanismos, foram propostos dispositivos que retificam luz ou calor. Para a retificação de calor (luz), o fluxo de calor (a onda eletromagnética), viaja facilmente em um sentido, e com dificuldade no sentido oposto. Assim, foram criados vários dispositivos para obter tal fenômeno: retificador de luz usando efeito Doppler assimétrico em cristal fotônico [14]; diodo óptico feito com a união experimental de dois cristais fotônicos de silício diferentes [20]; diodo óptico usando estruturas eletromagnéticas assimétricas como guias de onda [21–23]; diodos térmicos utilizando elementos assimétricos e propriedades térmicas

não-lineares [13, 24–28]; diodo térmico desenvolvido através dispersores de calor assimétricos [28]; diodo térmico usando o defeito topológico desclinação por escape radial presa em um tubo capilar [5, 29]; Estrutura cônica única para concentração, divergência, deslocamento e divisão de feixes eletromagnéticos [19]; sendo em 2018 proposto um dispositivo [7] que faria a retificação simultânea de luz e calor.

## 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 criar uma película capaz de retificar luz e calor simultaneamente. Para isto, usamos um defeito topológico conhecido como desclinação por escape radial, confinado vários diodos em formato de tronco de cone contendo o cristal líquido 5CB, onde descrevemos suas propriedades térmicas e ópticas numericamente, utilizando o software de elementos finitos COMSOL Multiphysics.

## 1.3 Objetivos

### 1.3.1 Objetivos Gerais

Simular computacionalmente uma película composta por um recipiente de vidro borossilicato que confina vários diodos multifísicos a base de cristal líquido nemático, visando o efeito de retificação térmica e óptica.

### 1.3.2 Objetivos Específicos

- Utilizar parâmetros controláveis úteis nas simulações do dispositivo, tais como: comprimento de onda, comprimento do raio e relação entre os raios, ângulo de ancoramento, fluxo de calor, intensidade do campo elétrico.
- Estudar a relação entre as retificações óptica e térmica e os parâmetros controláveis;
- Buscar as maiores retificações variando os parâmetros.

## 1.4 Metodologia

Nesta dissertação, empregou-se o cristal líquido nemático calamítico (moléculas alongadas - formato bastão) termotrópico [1, 30], especificamente, 4'-pentil-4-cianobifenil (5CB) [31–33], que apresenta apenas a mesofase nemática com suas moléculas anisotrópicas e propriedades físicas (por ex. condutividade térmica) dependentes da temperatura (apresentadas no capítulo 2) [32, 33]. A fase nemática tem a importante característica de suas moléculas estarem posicionadas aleatoriamente no espaço, contudo orientadas na direção de vetor unitário, nomeado vetor diretor e representado por  $\hat{n}$ , vide figura (1.1). Portanto, alterar a direção do diretor implicará na modificação das propriedades anisotrópicas do material, dentre elas: óptica [34–36], térmica [37, 38] e acústica [30, 39, 40].

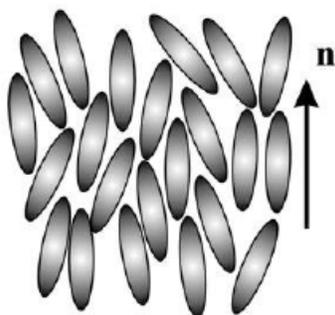


Figura 1.1: Organização ilustrativa das moléculas de um cristal líquido nemático.

Observa-se que o diretor  $\hat{n}$  representa a direção média das moléculas da amostra [1].

(Oswald e Pieranski, 2005)

Os defeitos topológicos na fase nemática podem aumentar a aplicação de diversos materiais desenvolvidos a partir de cristais líquidos [36, 41, 42]. Um defeito de interesse, para uma configuração do  $\hat{n}$ , é a chamada desclinação de escape radial<sup>1</sup> [1, 5, 43–45], ilustrada na figura (2.7), que ocorre quando o material líquido-cristalino está confinado em um tubo capilar. O interessante deste último defeito é a sua assimetria axial provocada pelo “escape” das moléculas. A anisotropia axial da desclinação de escape radial e as propriedades térmicas não-lineares, do cristal líquido 5CB, são responsáveis pelo efeito de retificação em diodos térmicos produzidos por tais materiais [5].

<sup>1</sup>Descrito com mais detalhes no capítulo 2

Neste trabalho, investigamos a possibilidade de projetar uma película multifísica de diodos a partir de cristais líquidos nemáticos confinados em uma cavidade com geometria de tronco de cone.

Primeiramente, o tensor de condutividade térmica é determinado e implementado a partir de propriedades algébricas do vetor diretor  $\hat{n}$  e das dependências de temperatura das condutividades térmicas moleculares<sup>2</sup> (paralelas ( $k_{\parallel}$ ) e transversais ( $k_{\perp}$ ), em relação ao eixo molecular principal). Estabelecemos um fluxo térmico em uma das bases (sentido direto), mantendo a outra base com uma temperatura constante. Posteriormente, invertemos o fluxo e a base em que a temperatura é mantida constante e assim obtemos os valores de temperatura média em cada superfície, afim de calcular a retificação térmica. No capítulo 3 apresentamos os diversos fatores que modificam a retificação térmica da película sem incluir a retificação óptica.

Em segundo lugar, implementamos o tensor permissividade dielétrica a partir das propriedades algébricas do vetor diretor  $\hat{n}$  e das dependências de temperatura das permissividades dielétricas<sup>3</sup> moleculares (paralelas ( $\epsilon_{\parallel}$ ) e transversais ( $\epsilon_{\perp}$ ). O cálculo do fator de retificação óptica é realizado com as seguintes condições: a partir dos troncos de cones confinados na película preenchidos com um cristal líquido termotrópico na fase nemática (5CB) sujeito a um regime de ancoramento homeotrópico ou inclinado, com um defeito de desclinação de escape radial, na base maior (podia ser na menor) do tronco de cone uma temperatura constante é estabelecida e é executada a primeira parte da simulação.

Vão existir variáveis de dependências dielétricas não resolvidas, nesse passo configuramos outra seção do COMSOL Multiphysics com o fluxo óptico de modo diferente. Inserimos um fluxo de campo elétrico na direção do escape (configuração direta) e também na direção oposta a ele (configuração inversa). Um campo constante é estabelecido em uma das bases da película e então realizamos uma simulação para encontrarmos o valor de campo elétrico médio na base do tubo onde foi inserido o fluxo de campo elétrico. Com esses valores calculamos a diferença de campo elétrico entre as bases. Fazemos esse procedimento tanto

---

<sup>2</sup>As propriedades térmicas serão apresentadas na seção 2.7

<sup>3</sup>As propriedades dielétricas serão apresentadas na seção 2.8

para a direção direta quanto para direção inversa e os resultados encontrados são utilizados para calcular a retificação óptica da película.

Finalmente, estuda-se a influência de fatores extrínsecos relacionados à geometria do tubo confinante e intrínsecos relacionados às características que interferem na anisotropia molecular e conseqüentemente impactam na retificação óptica. Os resultados obtidos apresentam retificações na ordem de 1057%, muito maiores que os valores encontrados em outros trabalhos com geometria distinta [2, 5, 7], bem próximo de um único diodo em formato tronco de cone [6, 29] ou com metamateriais na composição do diodo térmico [13, 25, 46, 47], que obtiveram resultados entre 2% até 140%. Isto comprova a alta eficiência e interesse tecnológico agregado do dispositivo proposto.

## 1.5 Estrutura do trabalho

Esta dissertação está estruturada em 4 capítulos. Inicialmente, no capítulo 1, é apresentada a motivação e o problema proposto, assim como a metodologia utilizada. O capítulo 2 expõe os fundamentos necessários sobre cristais líquidos, desde a contextualização histórica, definição, classificação, até as mesofases usadas no trabalho e algumas aplicações, mostra a formação do defeito topológico em meio líquido-cristalino, e como é definido o defeito do tipo desclinação, em particular, a desclinação por escape radial. São apresentadas também as propriedades multifísicas dos cristais líquidos, onde temos a propagação anisotrópica e os tensores. No capítulo 3, temos a proposição do dispositivo retificador de luz e calor, a película multifísica, onde são mostrados os resultados obtidos tanto de retificações térmicas como a da retificação óptica (multifísica com a térmica) e a idealização do aparelho. Por fim, no capítulo 4, temos as conclusões do trabalho.

*Existem muitas hipóteses em ciência que estão erradas. Isso é perfeitamente aceitável, elas são a abertura para achar as que estão certas*

---

Carl Sagan

---

---

## CAPÍTULO 2

---

### FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA

#### 2.1 Cristais Líquidos: sólido ou líquido?

Georges Friedel, famoso mineralogista e cristalógrafo do fim do século XIX e início do XX, foi quem contribuiu na nomenclatura, organização e classificação dos estados intermediários da matéria, dos quais seriam posteriormente chamados pelo mesmo de *estados mesomórficos da matéria*. Essa denominação surgiu para corrigir o conceito adotado pelo pioneiro nos estudos desses estados da matéria, o físico Otto Lehmann, em atribuir simplesmente, por conta da característica intermediária do composto entre os sólidos cristalinos e líquidos isotrópicos, o nome de cristais líquidos ou fluídos cristalinos, levando ao fato de não considerar que existiam várias fases de transição, as *mesofases*. É conhecido como um estado mesomórfico invariavelmente separado da forma cristalina e da forma amorfa (líquido isotrópico) por transições de fase descontínuas e quebra da simetria orientacional das moléculas [1]. O nome vem do fato de que, devido às interações moleculares, além da fluidez característica dos líquidos, possui propriedades comumente observadas nos sólidos cristalinos, como propriedades que variam com a orientação das moléculas, de acordo com efeitos elétricos, ópticos e magnéticos.

Friedel nomeia os novos estados da matéria classificando essas mesofases em: *nemática*, *esmética* e *colestérica*. Por questões de formalidades em relação a descoberta feita por Otto Lehmann, é mantido o nome de tais estruturas de Cristais Líquidos [5].

## 2.2 As Mesofases

### 2.2.1 Nemática

Em seus trabalhos, Friedel destacou uma estrutura semelhante a filamentos finos, em um formato de bastão, também chamado de calamítico, para caracterizar a fase nemática. Nesta mesofase, existem descontinuidades únicas ao meio, das quais foram posteriormente atribuídas o nome de desclinações ou defeitos topológicos. Uma delas, a desclinação por escape radial, motivo desta dissertação, com a qual obteremos a esperada retificação térmica e óptica na película. A desclinação por escape radial será detalhada na subseção 2.4.

Simultaneamente, foi descoberto outro arranjo de moléculas, o discótico, que são moléculas com formato de disco. Nesta estrutura molecular, também são apresentadas mesofases, como a nemática e a colunar. Essas descontinuidades são acentuadas na medida em que a temperatura do meio aumenta, o que faz com que o vetor diretor  $\hat{n}$  sofra flutuações em sua orientação e seja alterado em relação a sua direção e sentido, em diferentes fases, de acordo com a orientação geral das moléculas, conforme mostrado na figura 2.1 [1, 5, 29].

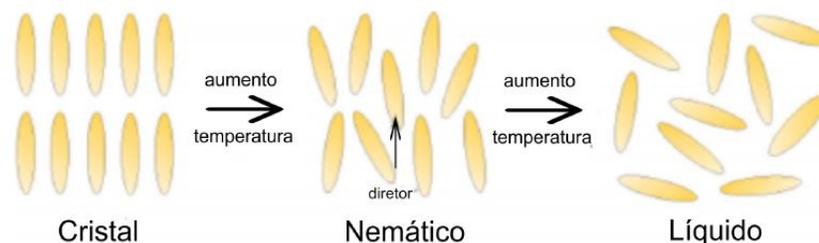


Figura 2.1: Implicação do aumento da temperatura na influência do ordenamento molecular sob o vetor diretor  $\hat{n}$  apresentando as fases cristalina, nemática e líquido isotrópico. As moléculas da figura apresentam formato calamítico [2].

(Melo, 2015)

Ainda em relação ao vetor  $\hat{n}$ , a fase nemática possui ordem orientacional uniaxial, onde temos um único eixo de simetria definido pelo diretor  $\hat{n}$  ou biaxial, que além do eixo principal em relação ao diretor, possui orientação em um eixo secundário, conforme pode ser mostrado nas figuras 2.2 e 2.3. Cristais líquidos na fase nemática possuem fluidez semelhante a de líquidos isotrópicos, como também são facilmente alinhados caso um campo eletromagnético externo seja aplicado, o que justifica seu uso em telas de LCD, pois, eles reagem de maneira previsível podendo controlar assim a passagem de luz [48, 49].

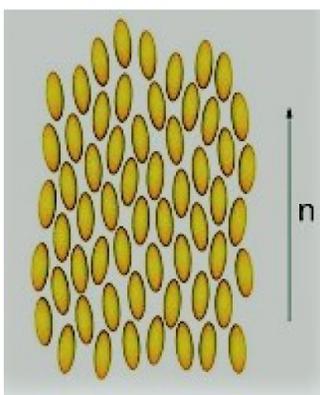


Figura 2.2: Moléculas nemáticas com eixo orientacional uniaxial [3]. (Carvalho, 2010)

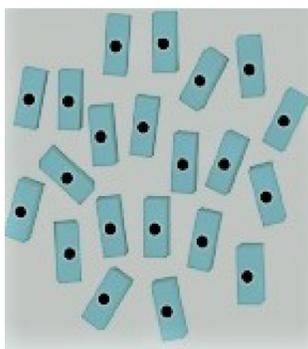


Figura 2.3: Moléculas nemáticas com eixo orientacional biaxial [3]. (Carvalho, 2010)

### 2.2.2 Colestérica

Considerado por Friedel como um tipo especial de arranjo molecular da mesofase nemática, a colestérica possui uma orientação molecular média que tem um momento de torção em torno de um eixo em específico, não sendo o eixo do vetor diretor  $\hat{n}$ .

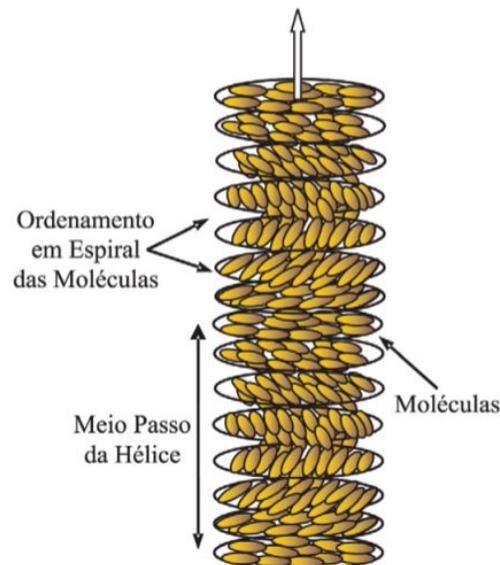


Figura 2.4: Estrutura do ordenamento da mesofase colestérica. Em destaque, o meio-passo de Hélice, indicando o parâmetro de espiral em torno de um eixo fixo, ou eixo helicoidal. Cada agrupamento de moléculas possui ordenamento em torno do vetor diretor de cada camada [4]. (Ely, 2007)

Essa estrutura molecular pode ser observada como uma sobreposição de planos contínuos, nos quais há constituintes básicos de acordo com uma determinada orientação local, sendo o diretor  $\hat{n}$ , plano a plano. Em relação à orientação molecular média, que também podemos chamar de orientação global, os planos nemáticos seguem uma estrutura helicoidal com um passo de hélice  $P$  peculiar. Este passo refere-se à torção total (chegando a atingir  $360^\circ$ ) que as moléculas nemáticas de cada plano sofrem, sendo sensível a variações de temperatura. Em casos específicos, o passo é da ordem do comprimento da luz visível, o que faz com que sistemas que possuam esse tipo mesomórfico de moléculas adquiram características ópticas distintas, como a reflexão da luz em caráter específico [49]. Como procuramos mostrar, as mesofases dos cristais líquidos constituem um estado agregado próprio, denominado

estado mesomórfico. Um composto que possui uma ou mais mesofases de cristais líquidos é chamado de mesógeno [1, 49]. Essa classificação dos cristais líquidos surge em concordância com a simetria e o grau de ordem molecular, que também se refere a sua entropia. Portanto, as fases mesomórficas líquido-cristalinas são classificadas pelo grau de liberdade molecular e, como consequência disso, as transições de fase ocorrem pela quebra da ordem orientacional das mesmas, no que refere a interferência de maneira intrínseca do gradiente da temperatura e da pressão do sistema proposto.

### 2.2.3 Esmética

Outras observações realizadas por Friedel levaram à descoberta de uma mesofase onde as moléculas estão dispostas em camadas. Friedel apresentou o termo esmética, pois, esta estrutura molecular em camadas é muito frequente em soluções aquosas de sabões. As moléculas nesta fase mostram um grau de ordem translacional, condição que acontece quando as moléculas possuem certo arranjo espacial.

No entanto, apesar das camadas possuírem arranjo bem definido podendo deslizar uma sobre a outra, não há uma regularidade no posicionamento das moléculas em cada camada, ou seja, dentro de cada camada não há ordem: as moléculas podem mover-se livremente, como num líquido isotrópico, vide figura 2.5. Logo, a fase esmética é conhecida por moléculas organizadas em cama das, sendo a simetria translacional quebrada em ao menos uma direção no espaço [1]. Há diversas estruturas complexas que representam as fases esméticas. Em geral, as transições entre essas fases ocorrem por variações na temperatura, a pressão constante [1].

## 2.3 Parâmetro indutor de fase

Além desta classificação das mesofases, mencionadas por Friedel, foram observadas basicamente duas classes gerais de cristais líquidos com relação ao seu parâmetro indutor de fase: o termotrópico e o liotrópico.

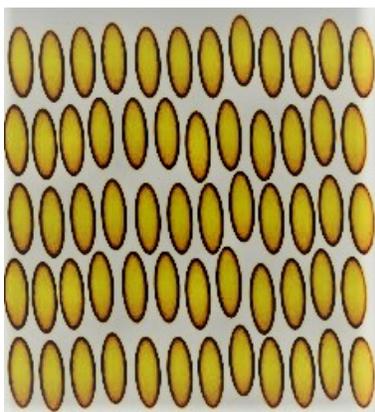


Figura 2.5: Organização ilustrativa das moléculas de um cristal líquido esmétrico-A com constituintes elipsoidais [3]. (Carvalho, 2010)

### 2.3.1 Termotrópico

Os cristais líquidos termotrópicos transitam entre fases ao atingirem certas temperaturas [50]. Se a temperatura for muito elevada, o movimento térmico irá destruir a ordem da fase do cristal líquido e transformar o material em uma fase líquida isotrópica. Em temperatura muito baixa, a maioria dos cristais líquidos tenderá a formar um cristal convencional [30]. Certos cristais líquidos termotrópicos exibem uma variedade de fases à medida que a temperatura é alterada. Por exemplo, ao aquecer um tipo particular de molécula de cristal líquido podem surgir várias fases esmétricas seguidas da fase nemática e, finalmente, a fase isotrópica à medida que a temperatura aumenta. Um exemplo de um composto que exhibe comportamento de cristal líquido termotrópico é o 4'-pentil-4-cianobifenil (5CB), vide figura 2.1. Percebe-se uma desagregação progressiva do ordenamento molecular, as moléculas tendem a se movimentar (girar e/ou oscilar) rapidamente sobre um ou mais eixos [51].

### 2.3.2 Liotrópico

Os cristais líquidos liotrópicos não são substâncias puras, mas soluções de moléculas anfífilas em um líquido altamente polar, tal como a água, por exemplo. Existem várias combinações factíveis de componentes para a formação de agregados moleculares que organizam-se no espaço, exibindo algum grau de ordem (p. ex. ácidos graxos em água, fosfolípídeos em água etc). A formação de uma mesofase liotrópica, como visto, é dependente das concen-

trações relativas dos componentes da mistura (moléculas anfífilas e solventes). Portanto, cristais líquidos liotrópicos exibem transições de fase (nemáticos, colestéricos etc) como uma função da temperatura, da pressão e da concentração relativa dos compostos [52], vide figura 2.6. Historicamente, os liotrópicos foram importantes porque os sabões formam cristais líquidos quando dissolvidos em água e são um exemplo cotidiano de um cristal líquido liotrópico. Hoje, eles também são importantes como modelos para entender o funcionamento de membranas biológicas [1].

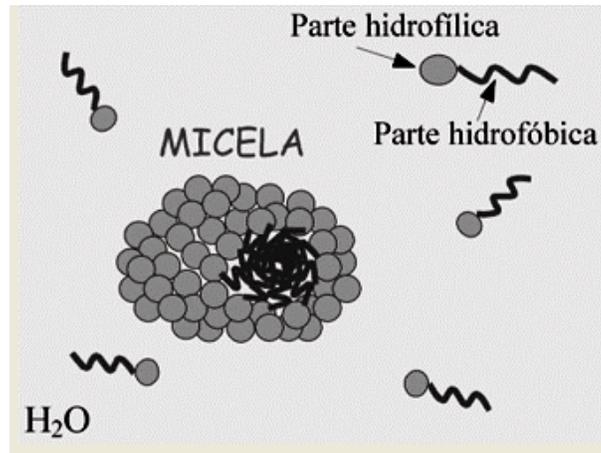


Figura 2.6: Esquema ilustrativo de cristais líquidos liotrópicos representados por moléculas anfífilas solúveis em água [2]. (Melo, 2015)

## 2.4 Desclinação por escape radial

Os cristais líquidos em sua fase nemática podem permitir diferentes tipos de defeitos topológicos quando confinados no interior de superfícies, sejam elas planas ou curvas. A condição na formação de tais defeitos é a minimização de energia a partir de uma interpretação mais geral da densidade de energia elástica livre de Frank-Oseen [1, 30, 50]

$$f = \frac{1}{2}(K_{11}(\text{div } \hat{n})^2 + K_{22}(\hat{n} \cdot \text{rot } \hat{n})^2 + K_{33}(\hat{n} \times \text{rot } \hat{n})^2) + \frac{K_{24}}{2}\text{div}(\hat{n}(\text{div } \hat{n}) + \hat{n} \times \text{rot } \hat{n}), \quad (2.1)$$

com  $K_{11}$ ,  $K_{22}$  e  $K_{33}$  ( $K_{11} \approx K_{22} \approx K_{33} \equiv K$ ) para facilitar o cálculo da minimização de

energia e obter a configuração de equilíbrio do diretor  $\hat{n}$ ) representando respectivamente as constantes elásticas das deformações ocasionadas pelo ordenamento molecular, devido à variação posicional do diretor: *afunilar*, *torcer* e *flexionar* e com  $K_{24}$  sendo a constante de *alongar* relacionada às superfícies curvas. Para essas superfícies, a constante elástica  $K_{24}$  tem um papel importante [43, 44] e um possível defeito formado por tal situação é a chamada *desclinação por escape radial* [1, 43, 50]. A figura 2.7 representa a configuração proposta de um defeito do tipo desclinação por escape radial numa geometria cilíndrica, com o sentido do escape para baixo  $-(\hat{z})$ .

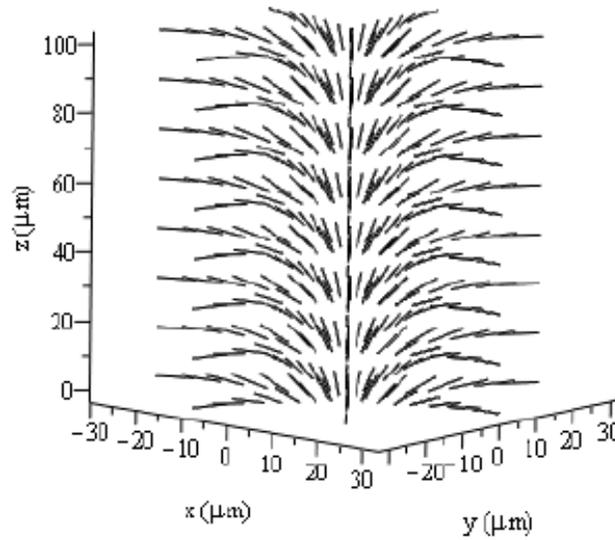


Figura 2.7: Visualização em 3D de moléculas do tipo bastão formando uma desclinação radial com escape na direção  $-\hat{z}$  em um tubo capilar (não mostrado) com raio  $R = 30 \mu m$  e altura  $H = 100 \mu m$  [5]. (Melo et. al, 2016)

A orientação espacial interna do diretor  $\hat{n}$  no tubo capilar é obtida a partir da minimização da energia elástica através das equações de Euler-Lagrange aplicadas à função  $f$  (2.1) em relação às condições de contorno [1, 30]. Para um capilar cilíndrico reto, uma possível solução do  $\hat{n}$ , em coordenadas cilíndricas, que cria uma desclinação por escape radial é dada por [43, 50]

$$\hat{n} = \text{sen}(\chi(r)), 0, \text{cos}(\chi(r)) \quad (2.2)$$

onde  $\chi(r)$  é o ângulo entre o diretor  $\hat{n}$  e o eixo  $z$  (em coordenadas cartesianas) e apenas tem

dependência radial.

O ângulo de âncoramento pode ser obtido a partir da equação [43]:

$$\chi(r) = 2 \cdot \arctan \left( \frac{r}{R} \tan \left( \frac{\chi_0}{2} \right) \right), \quad (2.3)$$

onde  $R$  é o raio do cilindro capilar que confina a deslocação radial em escape, e  $\chi_0$  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 [5, 7]. 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.

## 2.5 Ancoramento

Uma característica em que as moléculas de cristais líquidos têm de se orientarem às superfícies de contorno do recipiente que as contêm é chamada de ancoramento. O ancoramento na superfície confinante pode se dar de formas diferentes a depender: da mesofase, visto que, o efeito de superfície pode reagir de maneira diferente sendo mais ou menos sensível do que o outro e de como as moléculas se alinham em relação às superfícies ao qual estão confinadas, podendo ser: homeotrópico (perpendicularmente), planar (paralelamente) e inclinada (quando as moléculas se alinham de maneira a formar um ângulo com a normal), vide figura 2.8.

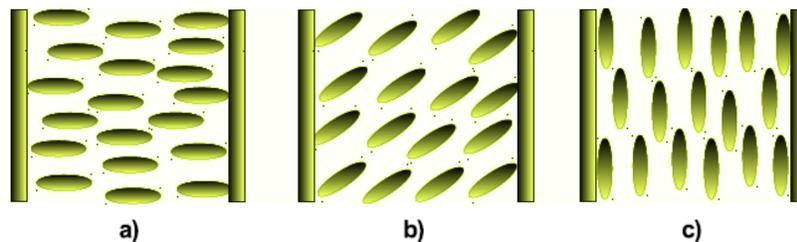


Figura 2.8: Tipos de ancoramento constatadas por moléculas de cristal líquido na superfície de uma estrutura: (a) Homeotrópico, (b) inclinado, (c) planar [6].

(Silva, 2018)

A força das interações das moléculas ligadas à superfície nos leva a distinguir o ancoramento em dois regimes: forte e fraco. O ancoramento é dito do tipo forte quando as forças de superfície são fortes o suficiente para impor uma orientação bem definida ao diretor  $\hat{n}$  até uma certa distância da superfície. O ancoramento é dito do tipo fraco quando a configuração do diretor não é bem definida, podendo variar rapidamente na superfície. De um modo geral, a força de ancoramento relaciona as dimensões da molécula com a distância, à qual, esta força mantém uma orientação bem definida ou não.

## 2.6 Propagação Anisotrópica

Sabemos que os cristais líquidos possuem anisotropia nas propriedades físicas, ou seja, propriedades como condutividade térmica, permissividade dielétrica 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 [5, 29, 37, 38, 53] e ópticas [34–36, 41, 44] de um cristal líquido nemático podem ser descritas por um tensor geométrico de segunda ordem, ou pela métrica [54],

$$\Omega_{ij} = \Omega_{iso}\delta_{ij} + \Omega_{aniso} \left( n_i n_j - \frac{\delta_{ij}}{3} \right) = g_{ij}. \quad (2.4)$$

Onde,

$$\Omega \equiv \begin{Bmatrix} k \\ \epsilon \\ \mu \end{Bmatrix}, \Omega_{iso} = \Omega_{iso} = \frac{\Omega_{\parallel} + 2\Omega_{\perp}}{3} \text{ e } \Omega_{aniso} = \Omega_{\parallel} - \Omega_{\perp}. \quad (2.5)$$

sendo  $n_i$  e  $n_j$  as componentes do vetor diretor,  $k_{ij}$  o tensor condutividade térmica,  $\epsilon_{ij}$  o tensor permissividade dielétrica,  $\mu_{ij}$  o tensor permeabilidade magnética,  $g_{ij}$  a métrica, e  $\delta_{ij}$  a delta de Kronecker. Os termos  $\Omega_{iso}$  e  $\Omega_{aniso}$  representam as condutividades térmicas, permissividades dielétricas ou permeabilidades magnéticas isotrópica e anisotrópica do material, respectivamente [7].

## 2.7 Propriedades térmicas

Pressupõe-se aqui a teoria geral da condutividade térmica de um cristal líquido nemático descrito, através da equação de Fourier (Eq. 2.6), por um tensor simétrico de segunda ordem relacionando o fluxo de calor  $q_i$  com o gradiente de temperatura da seguinte forma  $\partial T/\partial x_j$  [1].

$$q_i = -k_{ij} \frac{\partial T}{\partial x_j} \quad (2.6)$$

As propriedades térmicas dos cristais líquidos dependem da orientação local do vetor diretor  $\hat{n}$  [1, 37]. Em tal condição de orientação das moléculas, as propriedades anisotrópicas moleculares são sentidas macroscopicamente, fazendo com que o material, como um todo, desenvolva propriedades físicas anisotrópicas, incluindo as térmicas. É conhecido que a condutividade térmica de um cristal líquido nemático é anisotrópica, levando a valores diferentes ao longo do diretor e nas direções perpendiculares a ele. Uma formulação matemática de tal propriedade é representada pelo tensor de condutividade térmica, onde seus componentes  $k_{ij}$  (em função da soma das condutividades térmicas isotrópicas e anisotrópicas do material) em coordenadas cartesianas podem ser escritos como [1]

$$k_{ij} = k_{iso} \delta_{ij} + k_{aniso} \left( n_i n_j - \frac{\delta_{ij}}{3} \right), \quad (2.7)$$

tensor simétrico, já descrito na sessão 2.6, que descreve a orientação molecular média ao longo do diretor  $\hat{n}$ . É não nula na fase nemática e vai para zero na fase isotrópica (traço nulo). Há uma junção da parte isotrópica (escalar) e com a parte simétrica anisotrópica. O  $\delta_{ij}$  (delta de kronecker) é a representação métrica do tensor de condutividade térmica no espaço plano, com

$$k_{iso} = \frac{k_{\parallel} + 2k_{\perp}}{3}, \quad (2.8)$$

$$k_{aniso} = k_{\parallel} - k_{\perp}. \quad (2.9)$$

Os coeficientes  $k_{\parallel}$  e  $k_{\perp}$  representam o tensor de condutividade térmica das moléculas do cristal líquido (semelhante a uma haste) nas direções paralelas e perpendiculares ao eixo maior da molécula tipo bastão, respectivamente (com  $k_{\parallel} > k_{\perp}$ ). Este resultado nos permite esperar que devido a uma deformação nas superfícies isotérmicas no sentido da desclinação, criando uma concavidade na direção do eixo longitudinal, a direção que produz a maior condutividade térmica seja a direção do escape:  $-\hat{z}$ . A anisotropia térmica ocasionada por tal efeito forçará a transferência de calor na direção  $-\hat{z}$  a convergir para o eixo longitudinal (maior) favorecendo o escape e apresentando a maior condutividade térmica na direção "direta" do diodo. No sentido oposto o fluxo de calor tenderá a se dispersar em torno do eixo principal, dificultando o fluxo térmico e apresentando menor condutividade térmica na direção "inversa" do diodo. O termo transferência de calor é assim designado como a energia térmica em trânsito devido a uma diferença de temperatura no espaço. A transferência de energia ocorre em um sistema da região de maior temperatura para a de menor temperatura. Neste trabalho, utilizamos o cristal líquido 5CB (5-cyanobiphenyl) [31–33], um material termotrópico cujas propriedades dependem da temperatura. Nas condutividades térmicas moleculares  $k_{\parallel}$  e  $k_{\perp}$ , implementamos tais dependências usando as equações [32]

$$k_{\parallel} = k_0 + k_1 \cdot (T - T_{NI}) + k_{1,\parallel} (T_C - T)^{\alpha_{\parallel}}, \quad (2.10)$$

$$k_{\perp} = k_0 + k_1 \cdot (T - T_{NI}) + k_{1,\perp} (T_C - T)^{\alpha_{\perp}}, \quad (2.11)$$

onde  $k_0$ ,  $k_1$ ,  $k_{1,\parallel}$ ,  $k_{1,\perp}$ ,  $T_{NI}$ ,  $T_C$ ,  $\alpha_{\parallel}$  e  $\alpha_{\perp}$  são constantes específicas do material 5CB estabelecidas por Ahlers *et al.* [32] relatando os resultados experimentais para as condutividades térmicas na fase nemática. O aumento do valor local da temperatura causará alterações na condutividade térmica do 5CB. Mais especificamente, uma diminuição da condutividade térmica molecular na direção paralela  $k_{\parallel}$  e uma tendência de manutenção da condutividade térmica na direção perpendicular  $k_{\perp}$ , até a temperatura de transição de fase nemática isotrópica ( $T_{NI}$ ), vide figura 2.9. Portanto, a condutividade térmica anisotrópica global do sistema,  $k_{\parallel} - k_{\perp}$ , tende a diminuir aumentando a temperatura, pois, ocorre uma maior dispersão da orientação das moléculas ao se aproximar da temperatura de transição

( $T_{NI}$ ).

A definição para retificação térmica adotada seguiu a equação (2.12). Aqui,  $\Delta T_i = T_{i,h} - T_0$  é a diferença entre a mais alta temperatura em uma base, abaixo produzida pelo calor bombeado no cilindro quando se trabalha na configuração inversa (direção de menor condutividade térmica),  $T_{i,h}$ , e a temperatura inicial  $T_0$  na base oposta mantida constante durante toda a simulação. De maneira análoga, temos  $\Delta T_d = T_{d,h} - T_0$  quando estiver trabalhando na configuração direta (direção de maior condutividade térmica). A retificação encontrada por tal sistema foi da ordem de  $\approx 4\%$ . [5]

$$\text{Retificacao Termica} = \frac{\Delta T_i - \Delta T_d}{\Delta T_d} \quad (2.12)$$

## 2.8 Propriedades dielétricas

A orientação do versor diretor  $\hat{n}$  determina as propriedades térmicas e dielétricas do cristal líquido nemático. Assim, tem-se um tensor condutividade térmica ( $k_{ij}$ ), descrito em [5], que varia com o posicionamento molecular e seus parâmetros são características do material e da temperatura. De forma similar, tem-se o tensor permissividade elétrica [1],  $\epsilon_{ij}$ :

$$\epsilon_{ij} = \epsilon_{iso}\delta_{ij} + \epsilon_{aniso} \left( n_i n_j - \frac{\delta_{ij}}{3} \right), \quad (2.13)$$

onde,  $\delta_{ij}$  são os elementos de permissividade isotrópica homogênea;  $n_i$  e  $n_j$  são coordenadas do diretor;

$$\epsilon_{iso} = \frac{\epsilon_{\parallel} + 2\epsilon_{\perp}}{3}, \quad (2.14)$$

$$\epsilon_{aniso} = \epsilon_{\parallel} - \epsilon_{\perp}. \quad (2.15)$$

e  $\epsilon_{\parallel}$  e  $\epsilon_{\perp}$  são as permissividades dielétricas na direção paralela e perpendicular ao diretor.

Essas duas últimas são definidas a partir dos índices de refração para os raios extraordinários ( $n_e$ ) e ordinários ( $n_o$ ) usando as relações  $\epsilon_{\parallel} = n_e^2$  e  $\epsilon_{\perp} = n_o^2$ , definidas em [1].

Descritos em [7, 55], têm-se:

$$n_e \approx A - BT + \frac{2(\Delta n)_o}{3} \left(1 - \frac{T}{T_c}\right)^\beta, \quad (2.16)$$

$$n_o \approx A - BT - \frac{(\Delta n)_o}{3} \left(1 - \frac{T}{T_c}\right)^\beta, \quad (2.17)$$

onde, T é a temperatura que a molécula está submetida e, A, B,  $(\Delta n)_o$ ,  $\beta$  e  $T_c$  são constantes com base em experimentos. de acordo com [55], para o cristal líquido nemático 5CB.

Podemos definir a retificação óptica como

$$\text{Retificacao Optica} = \left| \frac{\Delta E_r^2 - \Delta E_f^2}{\Delta E_f^2} \right| \quad (2.18)$$

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,  $E_{i,r}(E_{e,r})$  tem a mesma representação, e  $f$  indica a direção direta do diodo.

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 [20].

## 2.9 Diodo multifísico à base de Cristal Líquido Nemático

Para a proposta da película multifísica, usamos a ideia do dispositivo multifísico [7] em formato de tronco de cone [29], utilizamos a desclinação por escape radial estudada por Melo [5], onde ele viu que a direção direta do diodo térmico está no mesmo sentido do escape. Dessa maneira, uma configuração semelhante para tentar retificar luz, o que fez com que o dispositivo já estudado termicamente, fosse utilizado para ambas funções, como mostrado na figura 2.9.

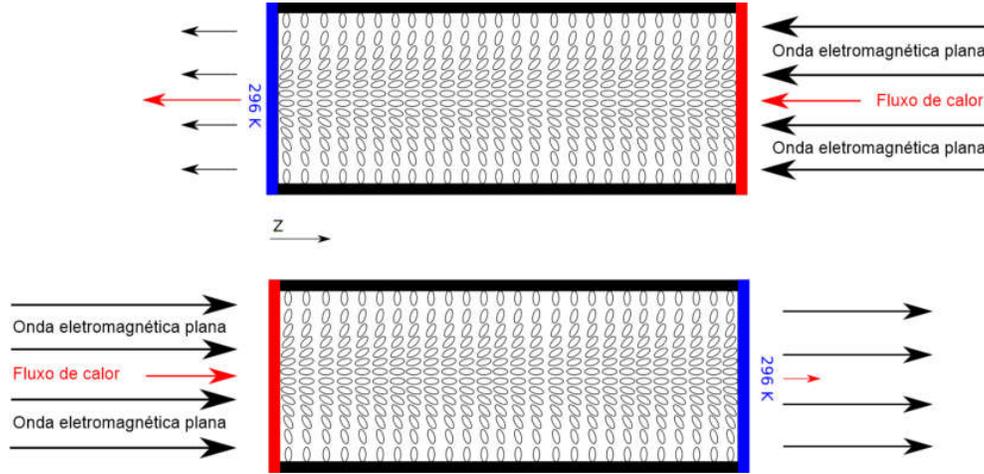


Figura 2.9: Representação do diodo multifísico com geometria cilíndrica. Visão axial do tubo capilar confinando a desclinação de escape radial na direção  $-\hat{z}$ . Para os resultados de Melo [5] *et. al*, a direção direta térmica do diodo é na direção da desclinação radial em escape, enquanto que no trabalho de Santos *et. al* [7] e Andrade [8] direção direta óptica é na direção  $+\hat{z}$ . (Santos *et. al*, 2018)

Os resultados apresentados no capítulo 3 enfatizam a retificação óptica, uma vez que temos resultados para retificação térmica de uma desclinação radial em escape na literatura [29]. Para isso, usamos o campo molecular da desclinação (Eq. 2.2) e as propriedades moleculares dependentes da temperatura, (Eq. 2.16 e 2.17), do cristal líquido nemático 5CB para obter as componentes do tensor (Eq. 2.13) de condutividade térmica, permissividade dielétrica 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.

$$q_i = - \sum_j^{x,y,z} k_{ij} \partial_j T(x, y, z), \quad (2.19)$$

$$\nabla \cdot \vec{q} = \sum_{i,j}^{x,y,z} \partial_i [k_{ij} \partial_j T(x, y, z)] = 0, \quad (2.20)$$

$$\nabla \times \mu_r^{-1} (\nabla \times \vec{E}) - k_0^2 \vec{E} = 0 \quad (2.21)$$

onde  $q_i$  é a componente do fluxo de calor  $\vec{q}$  proporcional ao gradiente de temperatura  $T$ ,  $k_{ij}$  é o tensor de condutividade térmica e o sinal negativo indica que a transferência de calor ocorre na direção da diminuição da temperatura [5],  $\mu_r$  é permeabilidade magnética relativa,  $E$  o campo elétrico aplicado em uma (ou outra) base,  $k_0$  número de onda,  $\epsilon_r$  é a permissividade elétrica relativa,  $\omega$  a frequência característica de oscilação,  $\epsilon_0$  a permissividade elétrica no vácuo e  $\sigma$  a condutividade elétrica.

## 2.10 Película multifísica à base de Cristal Líquido Nemático

Nesta última sessão destacamos o diferencial deste trabalho com outros existentes na literatura, exibindo algumas nomenclaturas e explicitando outros itens serão importantes para o entendimento do Capítulo 3 de Resultados.

Na figura 2.10 temos explicitamente o que é a relação entre os raios  $R_r$  de um diodo tronco de cone dentro da película. Para efeito de simplificação do desenho, nessa figura temos apenas 1 diodo. Na imagem temos que o raio maior do diodo é  $75 \mu m$  então automaticamente o raio menor do tronco de cone terá  $37,5 \mu m$  pois a razão entre os raios  $R_r$  é 0,5. A relevância dessa variável para a retificação multifísica é mostrada no capítulo seguinte.

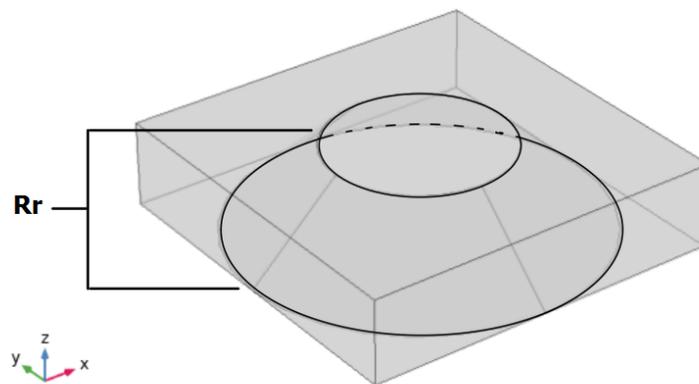


Figura 2.10: Representação de um diodo único com geometria tronco de cone numa caixa.

Tamanho da caixa:  $150 \mu m \times 150 \mu m \times 35 \mu m$ , Raio maior  $R = 75 \mu m$  e razão entre os raios  $R_r = 0,5$ .

Apresentando a geometria usada nas simulações dentro do COMSOL Multiphysics temos a figura 2.11, onde todos os diodos são iguais possuindo raio maior  $R = 75 \mu m$ , razão entre os raio  $R_r = 0,5$  e altura  $H = 35 \mu m$ , estando todos eles confinados dentro da caixa de borossilicato, formando a assim a película retificadora estudada neste trabalho.

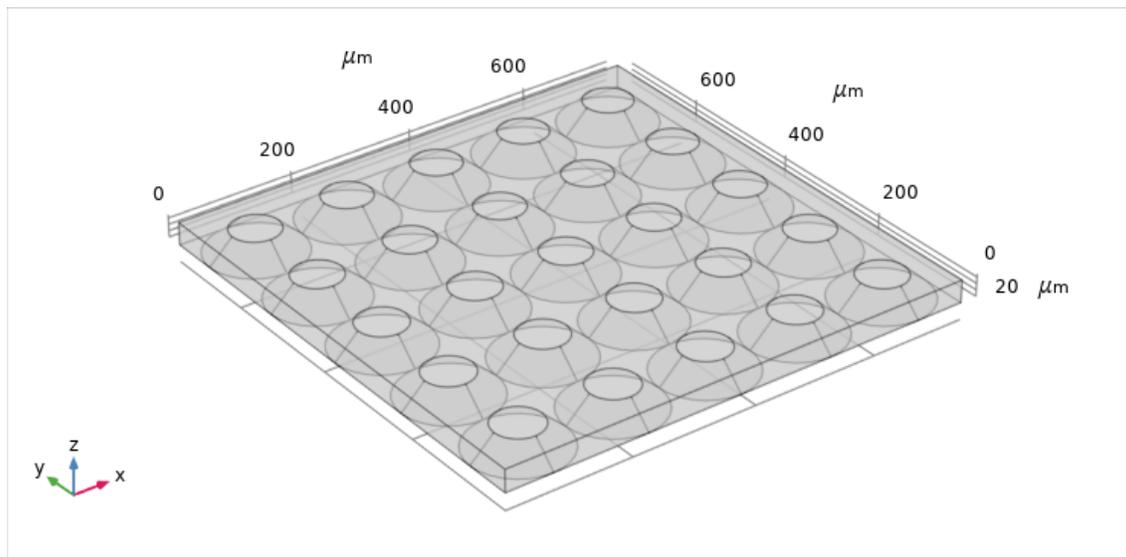


Figura 2.11: Representação dos 25 diodos multifísicos numa caixa de borossilicato formando a película.

Assim como no trabalho de Santos *et. al* [7], o sentido direto, ou seja, o sentido em que ocorre a retificação óptica, é o sentido  $+\hat{z}$ . A diferença é que neste trabalho, para as nossas simulações, o fluxo térmico sempre flui no mesmo sentido independentemente do sentido da onda plana, sendo o sentido  $+\hat{z}$  como escolhido para o fluxo de calor, como é mostrado na figura 2.12.

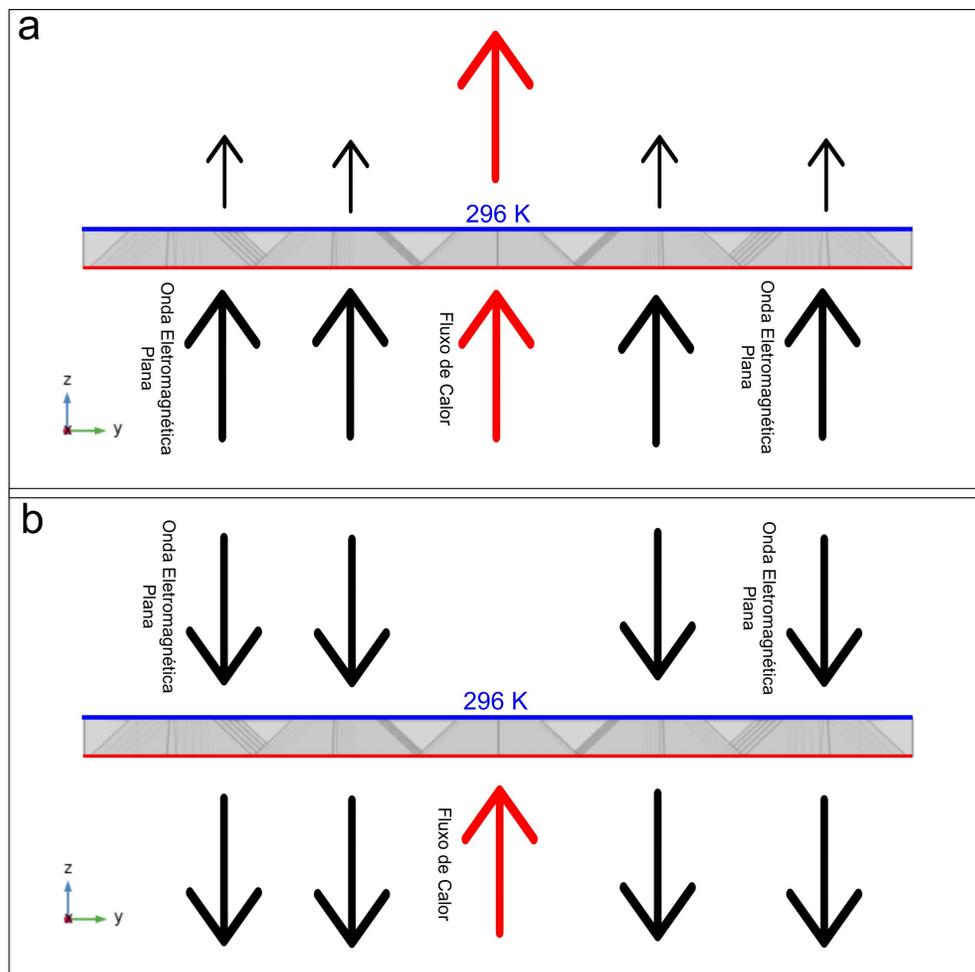


Figura 2.12: Visão lateral de 25 diodos multífisicos numa caixa de borossilicato formando a película. Indicação do sentido fluxo de calor e sentido da onda eletromagnética plana utilizado para as simulações.

*Na vida, não existe nada a  
temer, mas a entender.*

---

Marie Curie

---

---

## CAPÍTULO 3

---

### RESULTADOS E DISCUSSÕES

#### 3.1 Introdução

Uma película de diodos, diodos térmico-ópticos, está sendo apresentada neste trabalho. Sabemos que um diodo é um elemento que dificulta o fluxo em uma direção, mas facilita a passagem no outro. Neste estudo, investigamos como projetar, analisando parâmetros geométricos e físicos, uma película de diodos térmico-ópticos a partir de cristais líquidos nemáticos confinados em uma cavidade com geometria tronco de cone. O propósito é estudar a eficiência de uma película de diodos térmico-óptico à base de cristal líquido visando gerar a máxima retificação térmica e óptica possíveis. A retificação térmica e óptica são processos físicos importantes nos quais o calor e o campo elétrico fluem facilmente em uma direção, mas muito mais difícil na direção oposta. Uma vez bem entendido, estes fenômenos atraíram crescente atenção científica nos últimos anos, devido às suas excelentes aplicações (p. ex. transistores, circuitos lógicos, lentes transitions, diodos térmicos, películas para vidro de carro, etc) no gerenciamento térmico e óptico.

## 3.2 Retificação Térmica

Propomos uma película de retificação térmica composta por diodos térmicos cristalinos individuais [29] em uma caixa confinante (Figura 3.1), que pode ser usada em janelas de vidro. Para as simulações realizadas, o material da caixa de confinamento foi um vidro de borossilicato transparente [56], contendo 25 diodos térmicos, em tubos formato de tronco de cone, mantendo o cristal líquido transparente 5CB [57] formando uma desclinação por escape radial na direção  $-\hat{z}$ .

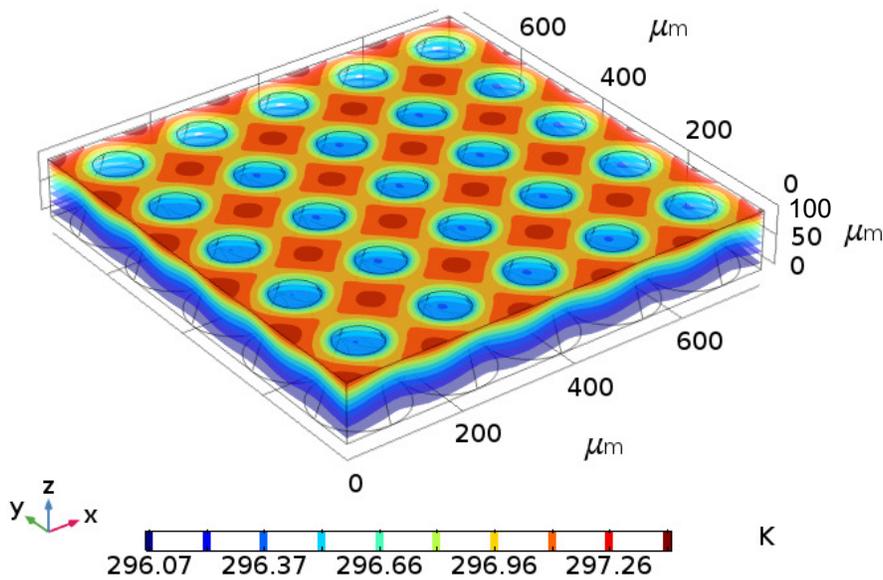


Figura 3.1: Superfícies isotérmicas de uma película retificadora térmica de borossilicato contendo 25 diodos à base de cristal líquido nemático (5CB). A película é um quadrado de  $750 \mu m$  com  $100 \mu m$  de altura. Os outros parâmetros são fluxo de calor  $Q = 5 \text{ kW}/m^2$ , temperatura inicial  $T_0 = 296 \text{ K}$ , raio maior do tronco de cone  $R_l = 75 \mu m$ , razão entre os raios  $R_r = 0,5$ , altura  $H = 100 \mu m$  e ângulo de ancoragem  $\chi_0 = 60^\circ$ . Para esses parâmetros, a retificação é de cerca de 17%.

Na configuração da Figura 3.1, assim como em diferentes configurações que serão apresentadas posteriormente, a retificação está bem abaixo de 1266 % para os diodos individuais [29], porque agora temos troca de calor com o material isotrópico entre os diodos, prejudicando a retificação. Essa troca de calor, que não foi considerada em trabalhos anteriores

[5, 29], foi implementada para aumentar a realidade das simulações. Em todas as simulações, a película apresentou uma direção direta quando o calor flui na direção  $-\hat{z}$  (a mesma do diodo isolado [29]), ou seja, do raio menor para o maior.

A temperatura ambiente e o fluxo de calor são aspectos relevantes para aplicações reais em que podem variar com o dia. A Figura 3.2 apresenta a influência da temperatura ambiente e a Figura 3.3 do fluxo de calor na retificação da película. Percebemos que a retificação aumenta de 1 % para 25 % ao substituir a água por 5CB nos tubos tronco de cone. Esse aumento ocorre devido à assimetria de inversão espacial da desclinação de escape radial do cristal líquido [7]. Também observamos que a retificação é robusta contra diferentes valores da temperatura ambiente e do fluxo de calor interno. Esse comportamento ocorre porque o aumento da condutividade térmica do borosilicato [56] repara a diminuição da condutividade térmica de 5CB [32], mantendo a retificação praticamente constante. Essa robustez contra influências térmicas é um recurso excelente para aplicações tecnológicas.

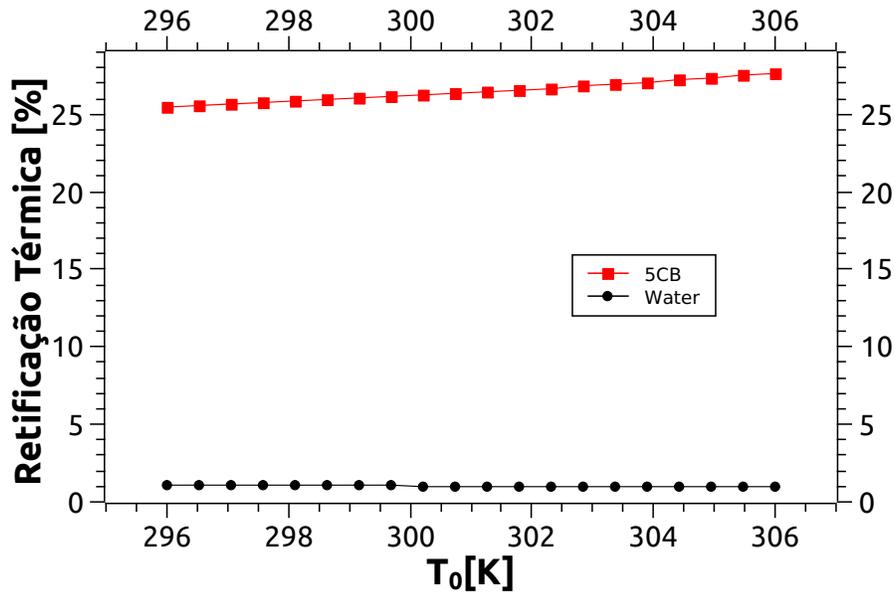


Figura 3.2: Retificação versus Temperatura inicial  $T_0$  para um fluxo de calor  $Q = 5 \text{ kW}/m^2$ . Os parâmetros utilizados nessa simulação foram: altura  $H = 35 \text{ }\mu\text{m}$ , razão entre os raios  $R_r = 0.5$ , raio maior  $R_l = 75 \text{ }\mu\text{m}$  e ângulo de ancoramento  $\chi_0 = 60^\circ$ .

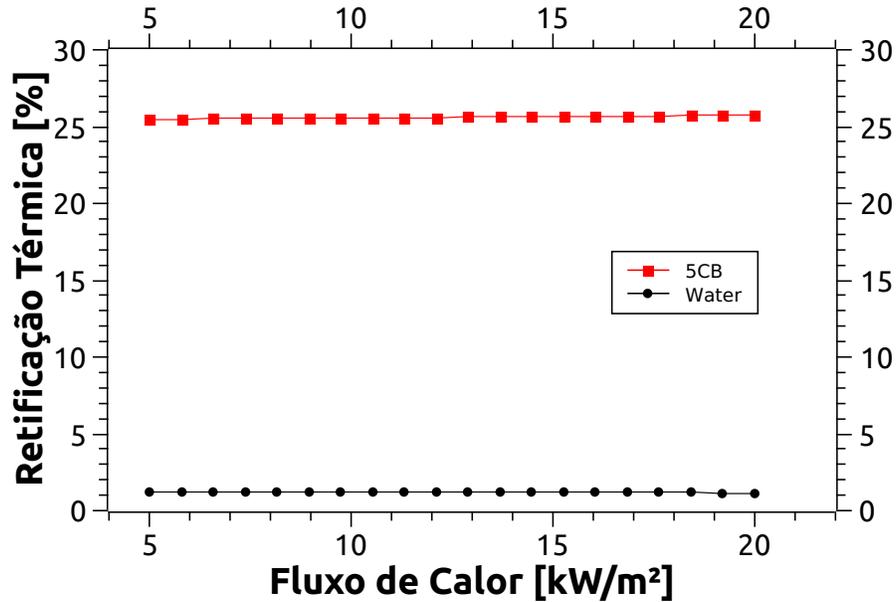


Figura 3.3: Retificação versus fluxo térmico  $Q$  para uma temperatura inicial  $T_0 = 296$  K. Os parâmetros utilizados nessa simulação foram: altura  $H = 35 \mu m$ , razão entre os raios  $R_r = 0.5$ , raio maior  $R_l = 75 \mu m$  e ângulo de ancoramento  $\chi_0 = 60^\circ$ .

Como deve ser configuração da forma dos diodos para que a retificação seja máxima? A Figura 3.4 mostra como a retificação térmica muda para cada valor de razão entre os raios  $R_r = \frac{R_{menor}}{R_{maior}}$  dos tubos tronco de cone individualmente. Vemos que, para  $RR = 0,4$ , há cerca de 31 %, que foi a retificação máxima obtida alterando os parâmetros. Para  $R_r \approx 1$ , a retificação é baixa [5, 7, 29] devido à isotropia dos diodos individuais. Se apertarmos demais o tronco de cone, a retificação cairá novamente [29] mas não se cancelará, devido à anisotropia molecular da desclinação por escape radial. Esses comportamentos confirmam resultados anteriores sobre a importância da forma na eficiência da retificação [13, 26, 58].

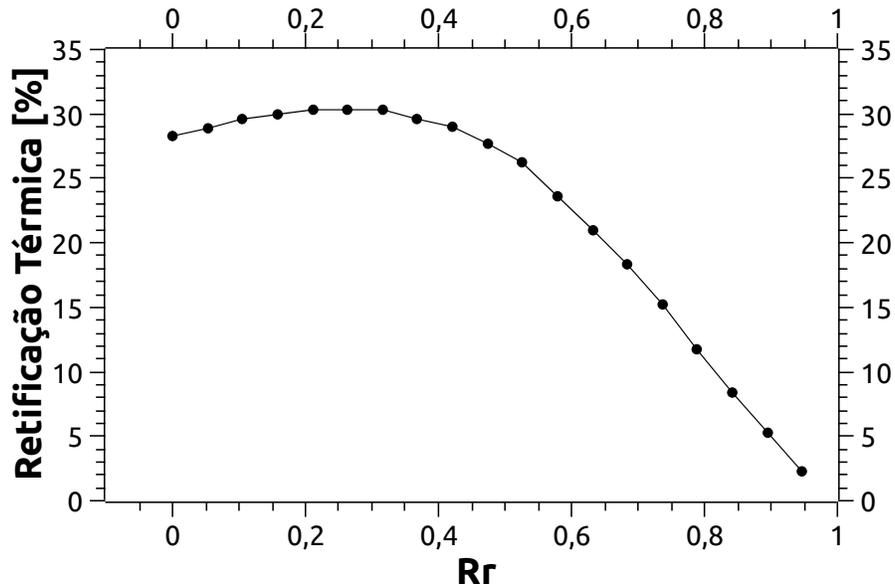


Figura 3.4: Retificação versus diferentes valores de razão entre os raios  $R_r = \frac{R_{menor}}{R_{maior}}$  do tronco de cone. Os parâmetros utilizados nessa simulação foram: altura  $H = 35 \mu m$ , raio maior  $R_l = 75 \mu m$ , ângulo de ancoramento  $\chi_0 = 60^\circ$  e fluxo de calor  $Q = 5 \text{ kW}/m^2$ .

A espessura da película é uma característica crítica da eficiência da película de retificadora e da quantidade de material usado para produzi-lo. Assim, medimos a retificação térmica para diferentes espessuras e exibimos os resultados na Figura 3.5. Observamos que a eficiência do filme diminui com a espessura, da mesma forma que o diodo único [5, 29]. Tal diminuição ocorre porque o aumento na altura dos diodos implica na redução da anisotropia da translação ao longo de seus eixos, fator essencial para o fenômeno da retificação [13, 26]. Além disso, aumentar a retificação com a diminuição da espessura da película favorece a economia de substâncias e a miniaturização da película.

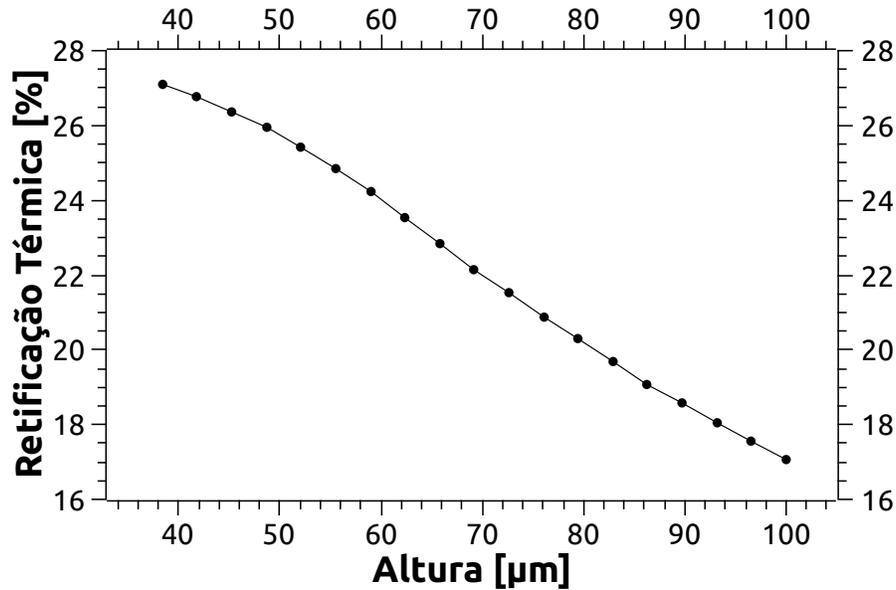


Figura 3.5: Retificação versus diferentes alturas  $H$ . Os parâmetros utilizados nessa simulação foram: razão entre os raios  $R_r = 0.5$ , raio maior  $R_l = 75 \mu\text{m}$ , ângulo de ancoramento  $\chi_0 = 60^\circ$  e fluxo de calor  $Q = 5 \text{ kW}/\text{m}^2$ .

O número de diodos na película também influencia a quantidade de material utilizado em sua fabricação. A ação desse número na retificação da película está na Figura 3.6. Observa-se que poucos diodos são suficientes para produzir a eficiência final da película e esse desempenho é praticamente independente do número de diodos, o que é um ponto positivo do ponto de vista de custo computacional por não se fazer necessário simular com muitos diodos (como por exemplo 100 diodos,  $10 \times 10$ ). Esse comportamento aumenta porque o volume com o material isotrópico e o com o diodo térmico aumenta com a extensão do filme. Essa propriedade é desejável porque garante que a eficiência da película é independente de seu tamanho.

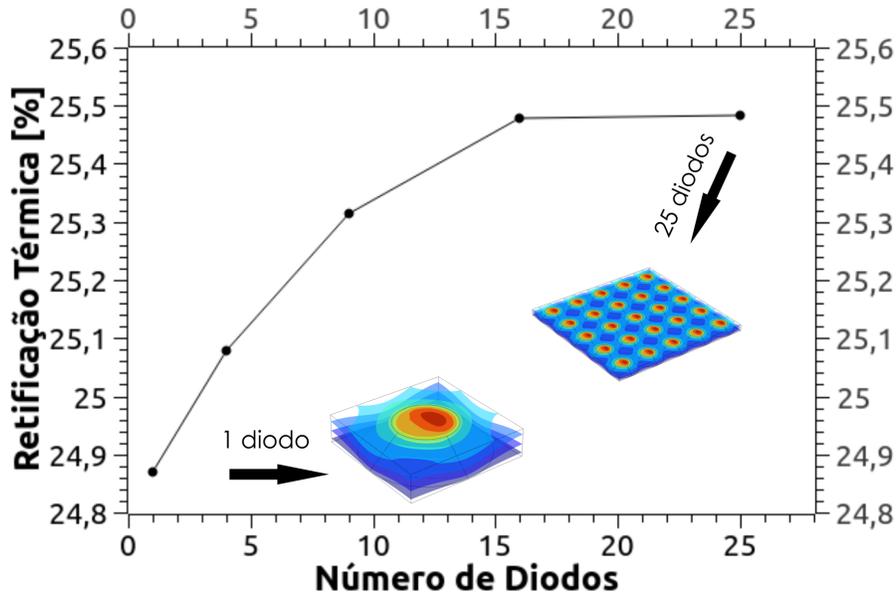


Figura 3.6: Retificação versus número de diodos, para um diodo em uma caixa de  $150 \mu\text{m} \times 150 \mu\text{m} \times 35 \mu\text{m}$  até 25 diodos em uma caixa de  $750 \mu\text{m} \times 750 \mu\text{m} \times 35 \mu\text{m}$ . Os outros parâmetros são fluxo de calor  $Q = 5 \text{ kW}/\text{m}^2$ , temperatura inicial  $T_0 = 296 \text{ K}$ , raio maior do tronco de cone  $R_l = 75 \mu\text{m}$ , razão entre os raios  $R_r = 0,5$ , altura  $H = 35 \mu\text{m}$  e ângulo de ancoragem  $\chi_0 = 60^\circ$ .

### 3.3 Retificação Multifísica

Uma vez entendido como os parâmetros controlam a retificação térmica da película, podemos analisar os resultados da retificação multifísica, que neste trabalho será térmica e óptica. Nesta subseção mostramos como a retificação óptica do mesmo conjunto de diodos se comporta uma vez que existe um fluxo térmico, como detalhado na seção 2.9.

Na Figura 3.7 a retificação óptica muda para cada valor de razão entre os raios  $R_r = \frac{R_{\text{menor}}}{R_{\text{maior}}}$  dos tubos tronco de cone individualmente. Vemos que, para  $RR = 0,76$ , temos impressionantes 1057 %, que foi a retificação óptica máxima obtida alterando os parâmetros, esse comportamento indica que há uma espécie de interferência construtiva entre a onda plana e tubo tronco de cone confinante quando  $RR$  está entre 0,6 e 0,8. Entretanto a razão entre os raios indo pra 1 ( $RR = 1$ ), vemos a tendência de queda, mostrando que pra um cilindro (diodo reto) [7] onde a retificação é em torno de 3 %, a geometria ter um tronco de

cone influencia positivamente nos valores.

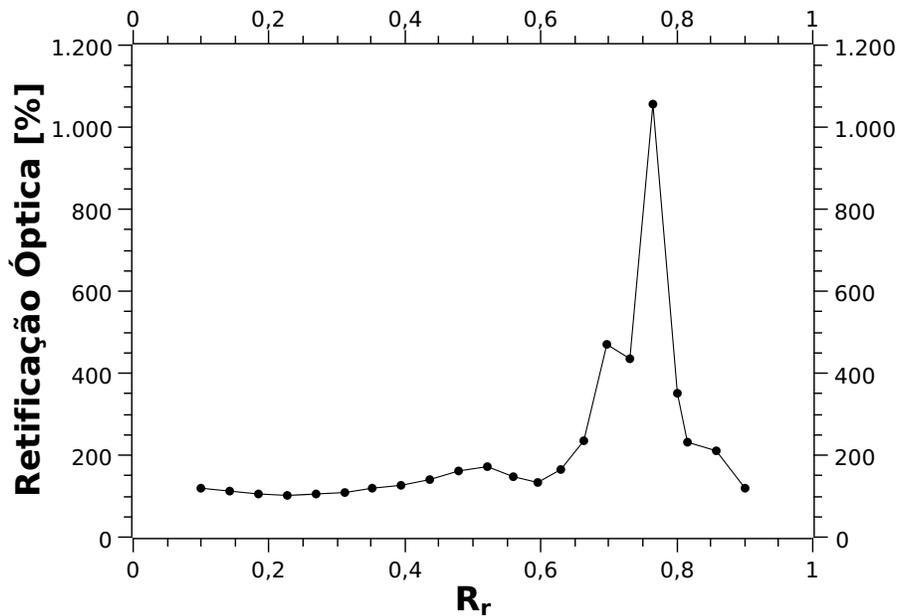


Figura 3.7: Retificação versus diferentes valores de razão entre os raios ( $\frac{r}{R}$ ) de uma película de diodos em formato tronco de cone confinando um cristal líquido nemático (5CB) na configuração de desclinação por escape radial. Os parâmetros utilizados nessa simulação foram: raio maior  $R_l = 75 \mu m$ , altura  $H = 35 \mu m$ , comprimento de onda  $\lambda = 50 \mu m$ , ângulo de ancoramento  $\chi_0 = 60^\circ$ , fluxo de calor  $Q = 5 kW/m^2$  e intensidade de campo elétrico  $E = 1 V/m$

A altura do diodo implica diretamente na espessura da película, quanto menos material for utilizado, menor o custo para produzir. Aqui na Figura 3.8 percebemos que os valores de retificação em função da altura dobram seguindo a seguinte regra: a partir de aproximadamente  $H = 60 \mu m$  o valor de retificação dobra a cada 20 micrômetros, como pode ser visto na imagem. Esse resultado mostra que quanto maior a altura, mais material existe para desviar a luz, fazendo com que ocorra esse aumento na retificação. Aqui temos um dilema. Revisitando a Figura 3.5 de retificação térmica em função da altura podemos notar que é o comportamento oposto, de queda de retificação com o aumento da altura, significa que seria necessário escolher um valor de altura em que ambas retificações tivessem valores bons. Entre outros motivos, a escolha de todas as simulações serem feitas com  $H = 35 \mu m$ ,

pois a retificação térmica é da ordem de 27 % e a retificação óptica na ordem de 110 %.

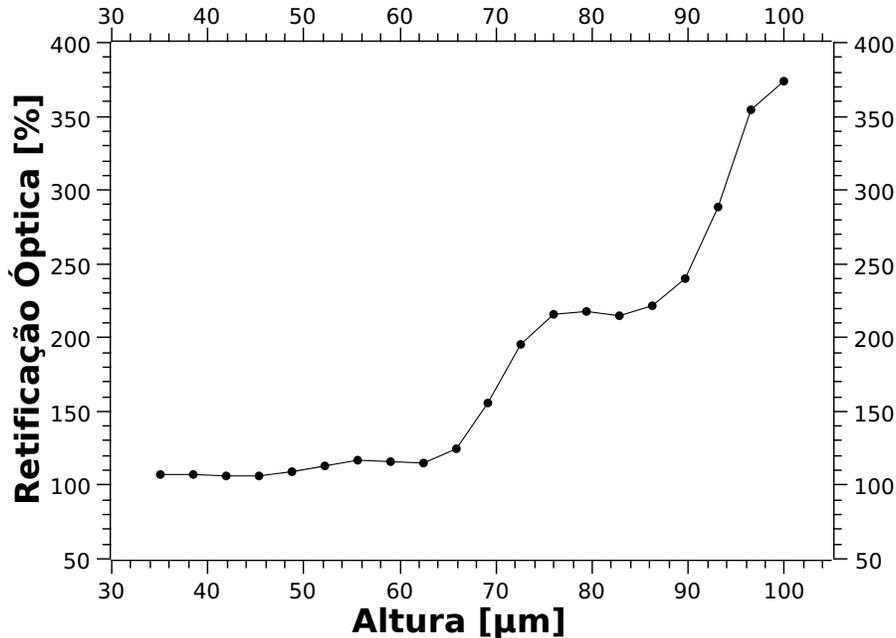


Figura 3.8: Retificação versus Altura para diferentes valores de altura  $H$  de uma película de diodos em formato tronco de cone confinando um cristal líquido nemático (5CB) na configuração de desclinação por escape radial. Os parâmetros utilizados nessa simulação foram: raio maior  $R_l = 75 \mu\text{m}$ , Razão entre os raios  $R_r = 0.5$ , comprimento de onda  $\lambda = 90 \mu\text{m}$ , ângulo de ancoramento  $\chi_0 = 60^\circ$ , fluxo de calor  $Q = 5 \text{ kW}/\text{m}^2$  e intensidade de campo elétrico  $E = 1 \text{ V}/\text{m}$ .

Estudamos também que efeito na retificação óptica teria ao alterarmos o raio maior do diodo dentro da caixa, limitando-o ao tamanho máximo de  $75 \mu\text{m}$  usado nas demais simulações. Mantemos aqui a razão entre os raios como sendo  $R_r = 0.5$ .

O comportamento depende da quantidade diodos, e de o que vamos chamar aqui, de "contra-diodo". O contra-diodo é o material isotrópico que fica entre os diodos e que tem o formato de tronco de cone no sentido contrário ao nosso, que é um aspecto suficiente para gerar anisotropia e gerar assim retificação na direção contrária. O diodo e o contra-diodo ficam competindo um com o outro. O material sem diodos não tem retificação, mas quando se coloca os nossos diodos, a retificação surge. Aumentando o raio maior dos nossos diodos, também aumentam a razão entre os raios dos contra-diodos. Estes produzem um máximo

de contra-retificação (ou seja, de retificação no sentido contrário ao nosso) para um certo raio maior (que na figura é próximo de 60 ) e depois eles perdem a disputa para os nossos diodos, pois a retificação que medimos volta a subir.

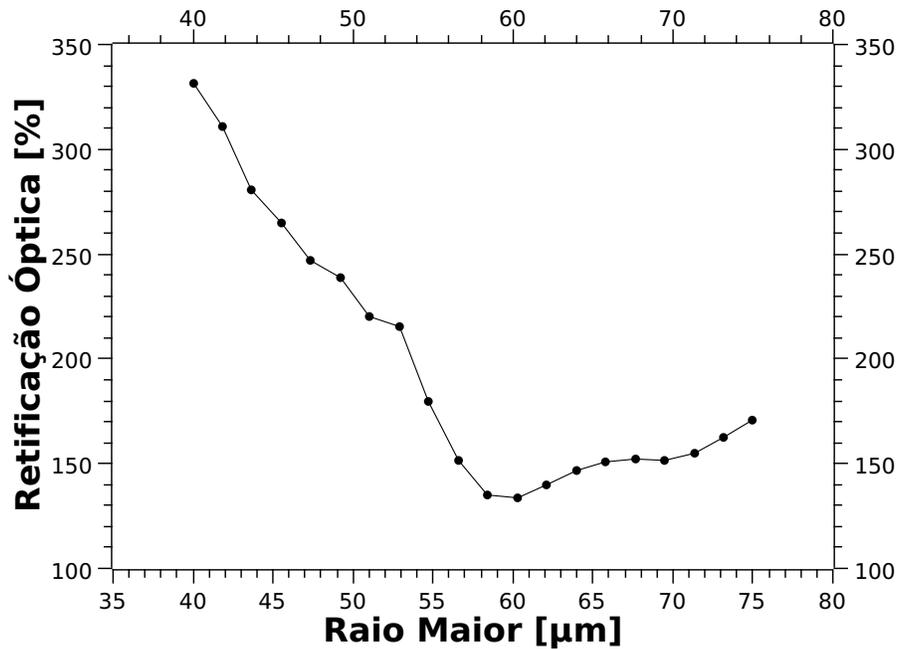


Figura 3.9: Retificação versus raio maior para diferentes valores de raio maior  $R_l$  de uma película de diodos em formato tronco de cone confinando um cristal líquido nemático (5CB) na configuração de desclinação por escape radial. Os parâmetros utilizados nessa simulação foram: razão entre os raios  $R_r = 0.5$ , comprimento de onda  $\lambda = 50 \mu\text{m}$ , ângulo de ancoramento  $\chi_0 = 60^\circ$ , fluxo de calor  $Q = 5 \text{ kW}/\text{m}^2$  e intensidade de campo elétrico  $E = 1 \text{ V}/\text{m}$ .

O comprimento de onda é um fator de muita importância nesse dispositivo, pois será ele pode ser submetido aos mais diversos comprimentos de onda do espectro eletromagnético e pode apresentar diferentes comportamentos. Analisamos aqui apenas comprimentos de onda na região dos micrômetros pois foi a utilizada para as simulações anteriores.

A retificação tem uma oscilação acentuada entre  $40 \mu\text{m}$  e  $70 \mu\text{m}$  onde ( $R_l < \lambda$ ) e uma queda brusca para  $\lambda > 70 \mu\text{m}$ , ou seja ( $R_l > \lambda$ ). Quando o raio da guia de onda fica da ordem do comprimento de onda que ela propaga, a guia deixa de propagar, fazendo com

que retificação caia quando  $\lambda$  se aproxima de  $75 \mu\text{m}$  [59, 60]. A oscilação inicial entre  $40 \mu\text{m}$  e  $70 \mu\text{m}$  pode indicar um estado transitório por se aproximar desse estado de corte de propagação da guia de onda.

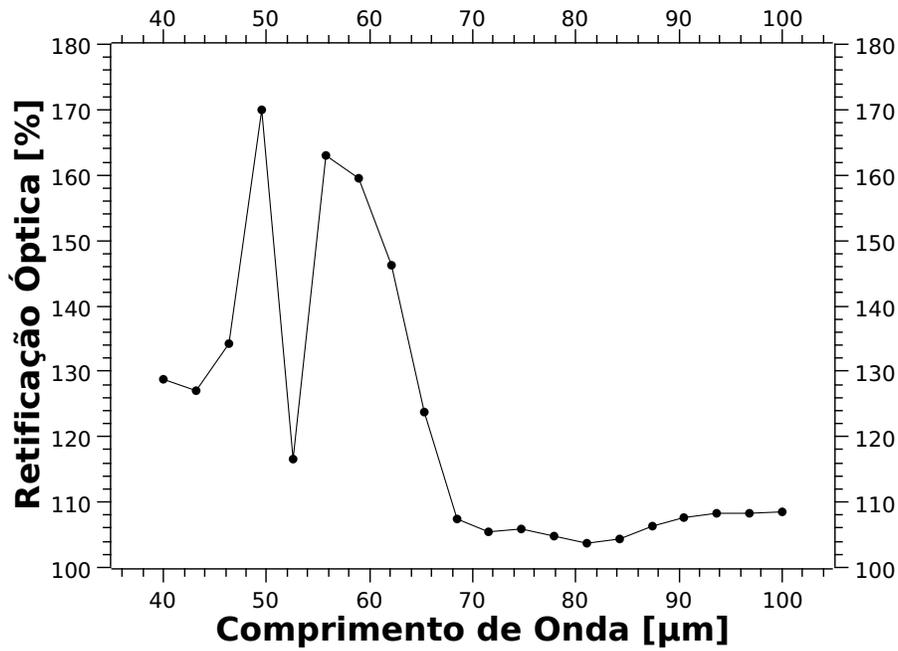


Figura 3.10: Retificação versus comprimento de onda para diferentes valores de comprimento de onda  $\lambda$  de uma película de diodos em formato tronco de cone confinando um cristal líquido nemático (5CB) na configuração de desclinação por escape radial. Os parâmetros utilizados nessa simulação foram: raio maior  $R_l = 75 \mu\text{m}$ , razão entre os raios  $R_r = 0.5$ , ângulo de ancoramento  $\chi_0 = 60^\circ$ , fluxo de calor  $Q = 5 \text{ kW}/\text{m}^2$  e intensidade de campo elétrico  $E = 1 \text{ V}/\text{m}$ .

*A ciência é o grande antídoto do veneno do entusiasmo e da superstição.*

---

Adam Smith

---

---

## CAPÍTULO 4

---

### CONCLUSÃO

Na primeira parte do trabalho, nós vimos que um cristal líquido nemático 5CB, na presença de um defeito topológico chamado desclinação de escape radial confinado em um tubo capilar, produz retificações de valores interessantes. Resolvendo as equações de difusão do calor, pelo método dos elementos finitos, utilizando o COMSOL, para a desclinação na direção  $-\hat{z}$ , encontramos uma retificação térmica de 37 %. Já a retificação óptica (já levando em consideração que existe um fluxo térmico) valores entre 118 % e 1057 % e vimos que a direção direta do diodo é na direção  $+z$ . 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 diferentes para a luz e para o calor.

Esses resultados implicam que a película apresenta resultados tão bons ou melhores do que o diodo estudado isoladamente. O diodo térmico com geometria tronco de cone retificando calor [29] apresenta 1266 % de retificação, enquanto a película térmica tem 37 % porém apresenta robustez contra o fluxo térmico, como já apresentado nos resultados. O diodo multifísico com geometria de cilindro reto [7] apresenta retificação em torno de 5 %, enquanto que a película multifísica apresenta pelo menos 118 % de retificação óptica. Isso mostra a película melhora o desempenho de um único diodo.

A película multifísica de cristal líquido nemático proposta pode diminuir o uso de energia elétrica em diversos ambientes como residências, indústrias e até mesmo automóveis. 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. Com isso, podemos usar os parâmetros de radiação incidente  $1 \text{ V/m}$ , fluxo de calor  $Q = 5 \text{ kW/m}^2$ , raio  $R = 75 \text{ }\mu\text{m}$ , comprimento  $H = 35 \text{ }\mu\text{m}$ , ângulo de ancoragem  $\chi_0 = 60^\circ$  e comprimento de onda  $\lambda = 50 \text{ }\mu\text{m}$ , e obter uma retificação óptica de aproximadamente 1057 %.

Para trabalhos futuros, uma possibilidade é a película para retificação acústica com a desclinação de escape radial. Tudo isso pode dar início a uma nova geração de películas de aplicação sobre vidros para as mais variadas aplicações. 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 futuras melhorias.

---

---

# APÊNDICE A

---

## LISTA DE VARIÁVEIS

Seção 1.4 -  $\hat{n}$  - Vetor diretor.

Seção 2.4 -  $\chi(r)$  - Ângulo entre o diretor e o eixo z.

Seção 2.4 - R - Raio do tubo capilar.

Seção 2.4 -  $\chi_0$  - Ângulo de ancoramento.

Seção 2.6 -  $n_i$  e  $n_j$  - Componentes do vetor diretor.

Seção 2.6 -  $k_{ij}$  - Tensor condutividade térmica.

seção 2.6 -  $\epsilon_{ij}$  - Tensor permissividade dielétrica.

Seção 2.6 -  $\mu_{ij}$  - Tensor permeabilidade magnética.

Seção 2.6 -  $g_{ij}$  - Métrica.

Seção 2.6 -  $\delta_{ij}$  - Delta de Kronecker.

Seção 2.6 -  $\Omega_{iso}$  e  $\Omega_{aniso}$  - Condutividades térmicas, permissividades dielétricas ou permeabilidades magnéticas do material. Isotrópica e Anisotrópica respectivamente.

Seção 2.7 -  $k_{\parallel}$  e  $k_{\perp}$  - Condutividade térmica das moléculas do cristal líquido nas direções paralelas e perpendiculares, respectivamente.

Seção 2.7 -  $\Delta T_i$  - Diferença entre a mais alta temperatura em uma base, abaixo produzida pelo calor bombeado no cilindro quando se trabalha na configuração inversa (direção de menor condutividade térmica),  $T_{i,h}$ , e a temperatura inicial  $T_0$  na base oposta mantida constante.

Seção 2.7 -  $\Delta T_d$  - De maneira análoga, temos  $T_{d,h} - T_0$  quando estiver trabalhando na configuração direta (direção de maior condutividade térmica).

Seção 2.8 -  $\epsilon_{\parallel}$  e  $\epsilon_{\perp}$  - Permissividades dielétricas na direção paralela e perpendicular ao diretor.

Seção 2.8 -  $n_e$  e  $n_o$  - Índices de refração para os raios extraordinários e ordinários, respectivamente.

Seção 2.8 -  $E_{i,r}$  e  $E_{e,r}$  - Magnitude do campo elétrico da onda eletromagnética no interior (exterior) na direção reversa do diodo óptico. Assim,  $E_{i,r}(E_{e,r})$  tem a mesma representação, e  $f$  indica a direção direta do diodo.

---

## REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- [1] Patrick Oswald and Pawel Pieranski. *Nematic and Cholesteric Liquid Crystals*. CRC Press Taylor & Francis Group, Florida, 2 2005.
- [2] D. F. Melo. Proposta de um Diodo Térmico Feito de Cristal Líquido. *Dissertação (Dissertação em Física) - Universidade Federal de Alagoas, Instituto de Física. Programa de Pós-Graduação em Física, Maceió, 2015*.
- [3] H. Carvalho. A física dos cristais. *Acesso em 15 de Maio de 2020. [Online]. Disponível em <https://sites.google.com/site/flcristaisliquidos/a-fisica-dos-cristais/>*.
- [4] Fernando Ely, Marcos H.Mamoru Otsuka Hamanaka, and Alaide Pellegrini Mammana. Cristais líquidos colestéricos: A quiralidade revela as suas cores. *Química Nova*, 2007.
- [5] 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, 9 2016.
- [6] José Guilherme Nascimento Sousa e Silva. Altas Retificações Térmicas Utilizando Cristais Líquidos Confinados em um Tronco de Cone. *Dissertação. (Dissertação em Engenharia) - Universidade de Pernambuco, POLI, Programa de Pós-Graduação em Engenharia de Sistemas, Recife, 2018*.

- [7] Silvio J. Santos, Jair Andrade, and Erms Pereira. Simultaneous rectification of heat and light using liquid crystal. *Journal of Applied Physics*, 2018.
- [8] Jair da Silva Andrade. Retificação em Cristal Líquido Nemático e Esmético sob Influência de Defeitos Topológicos. *Dissertação (Dissertação em Física) - Universidade Federal Rural de Pernambuco, Departamento de Física. Programa de Pós-Graduação em Física Aplicada, Recife, 2019.*
- [9] Martin Maldovan. Sound and heat revolutions in phononics. *Nature*, 503(7475):209–217, 11 2013.
- [10] Vladimir M. Shalaev. Optical negative-index metamaterials. *Nature Photonics*, 1(1):41–48, 1 2007.
- [11] Huanyang Chen, C. T. Chan, and Ping Sheng. Transformation optics and metamaterials. *Nature Materials*, 2010.
- [12] Sebastien Guenneau, Claude Amra, and Denis Veynante. Transformation thermodynamics: cloaking and concentrating heat flux. *Optics Express*, 2012.
- [13] C. W. Chang, D. Okawa, A. Majumdar, and A. Zettl. Solid-state thermal rectifier. *Science*, 2006.
- [14] 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*, 2013.
- [15] 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*, 2007.
- [16] Mehmet Fatih Yanik, Shanhui Fan, Marin Soljačić, and J. D. Joannopoulos. All-optical transistor action with bistable switching in a photonic crystal cross-waveguide geometry. *Optics Letters*, 2003.

- [17] 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*, 2012.
- [18] Viacheslav Kubytskyi, Svend Age Biehs, and Philippe Ben-Abdallah. Radiative bistability and thermal memory. *Physical Review Letters*, 2014.
- [19] Wallysson Barros, Antônio De, Antônio Santos, and Erms Pereira. Concentrating, diverging, shifting and splitting electromagnetic beams using a single conical structure. *Journal of Applied Physics*, 128:93105, 2020.
- [20] Chen Wang, Chang-Zhu Zhou, and Zhi-Yuan Li. On-chip optical diode based on silicon photonic crystal heterojunctions. *Optics Express*, 2011.
- [21] Katia Gallo, Gaetano Assanto, Krishnan R. Parameswaran, and Martin M. Fejer. All-optical diode in a periodically poled lithium niobate waveguide. *Applied Physics Letters*, 2001.
- [22] Bo Peng, Sahin 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*, 2014.
- [23] F. Fratini, E. Mascarenhas, L. Safari, J. Ph Poizat, D. Valente, A. Auffèves, D. Gerace, and M. F. Santos. Fabry-perot interferometer with quantum mirrors: Nonlinear light transport and rectification. *Physical Review Letters*, 2014.
- [24] C. Dames. Solid-State Thermal Rectification With Existing Bulk Materials. *Journal of Heat Transfer*, 131(6), 6 2009.
- [25] Baowen Li, Lei Wang, and Giulio Casati. Thermal diode: Rectification of heat flux. *Physical Review Letters*, 2004.
- [26] Markus Schmotz, Judith Maier, Elke Scheer, and Paul Leiderer. A thermal diode using phonon rectification. *New Journal of Physics*, 2011.

- [27] 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, 2014.
- [28] John Miller, Wanyoung Jang, and Chris Dames. Thermal rectification by ballistic phonons in asymmetric nanostructures. In *Proceedings of the ASME Summer Heat Transfer Conference 2009, HT2009*, 2009.
- [29] 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*, 2018.
- [30] P. G. de Gennes, J. Prost, and Robert Pelcovits. The Physics of Liquid Crystals . *Physics Today*, 1995.
- [31] M. Cui and J. R. Kelly. Temperature Dependence of Visco-Elastic Properties of 5CB. *Molecular Crystals and Liquid Crystals Science and Technology Section A: Molecular Crystals and Liquid Crystals*, 1999.
- [32] 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*, 1994.
- [33] L. M. Blinov, V. G. Chigrinov, and Jay S. Patel. Electro-Optic Effects in Liquid Crystal Materials . *Physics Today*, 1995.
- [34] Erms R. Pereira and Fernando Moraes. Flowing liquid crystal simulating the Schwarzschild metric. *Central European Journal of Physics*, 2011.
- [35] E. Pereira and F. Moraes. Diffraction of light by topological defects in liquid crystals. *Liquid Crystals*, 2011.
- [36] Sébastien Fumeron, Bertrand Berche, Fernando Santos, Erms Pereira, and Fernando Moraes. Optics near a hyperbolic defect. *Physical Review A - Atomic, Molecular, and Optical Physics*, 2015.

- 
- [37] S. Fumeron, E. Pereira, and F. Moraes. Modeling heat conduction in the presence of a dislocation. *International Journal of Thermal Sciences*, 2013.
- [38] S. Fumeron, E. Pereira, and F. Moraes. Principles of thermal design with nematic liquid crystals. *Physical Review E - Statistical, Nonlinear, and Soft Matter Physics*, 2014.
- [39] E. Pereira, S. Fumeron, and F. Moraes. Metric approach for sound propagation in nematic liquid crystals. *Physical Review E - Statistical, Nonlinear, and Soft Matter Physics*, 2013.
- [40] Eduardo Viana, Fernando Moraes, Sebastien Fumeron, and Erms Pereira. High rectification in a broadband subwavelength acoustic device using liquid crystals. *Journal of Applied Physics*, 2019.
- [41] Sébastien Fumeron, Erms Pereira, and Fernando Moraes. Generation of optical vorticity from topological defects. *Physica B: Condensed Matter*, 2015.
- [42] Sébastien Fumeron, Bertrand Berche, Fernando Moraes, Fernando A.N. Santos, and Erms Pereira. Geometrical optics limit of phonon transport in a channel of disclinations. *European Physical Journal B*, 2017.
- [43] G. P. Crawford, D. W. Allender, and J. W. Doane. Surface elastic and molecular-anchoring properties of nematic liquid crystals confined to cylindrical cavities. *Physical Review A*, 1992.
- [44] Sébastien Fumeron, Fernando Moraes, and Erms Pereira. Retrieving the saddle-splay elastic constant  $K_{24}$  of nematic liquid crystals from an algebraic approach. *European Physical Journal E*, 2016.
- [45] Alireza Shams, Xuxia Yao, Jung Ok Park, Mohan Srinivasarao, and Alejandro D. Rey. Mechanisms and shape predictions of nematic disclination branching under conical confinement. *Soft Matter*, 2014.
- [46] Martin Maldovan. Narrow low-frequency spectrum and heat management by thermocrystals. *Physical Review Letters*, 2013.

- [47] Maria José Martínez-Pérez, Antonio Fornieri, and Francesco Giazotto. Rectification of electronic heat current by a hybrid thermal diode. *Nature Nanotechnology*, 2015.
- [48] Joseph A. Castellano. *Liquid gold: The story of liquid crystal displays and the creation of an industry*. 2005.
- [49] Deng Ke Yang and Shin Tson Wu. *Fundamentals of Liquid Crystal Devices*. 2014.
- [50] M. Kleman; O. D. Lavrentovic. *Soft Matter Physics: An Introduction*. Springer Verlag, New York, 2004.
- [51] John W. Goodby. Chirality in liquid crystals. *Journal of Materials Chemistry*, 1991.
- [52] G. J. Vroege and H. N.W. Lekkerkerker. Phase transitions in lyotropic colloidal and polymer liquid crystals, 1992.
- [53] Sébastien Fumeron, Fernando Moraes, and Erms Pereira. Thermal and shape topological robustness of heat switchers using nematic liquid crystals. *European Physical Journal E*, 2018.
- [54] C W Misner, K S Thorne, J A Wheeler, and D I Kaiser. *Gravitation*. Princeton University Press, 2017.
- [55] Jun Li, Sebastian Gauza, and Shin Tson Wu. Temperature effect on liquid crystal refractive indices. *Journal of Applied Physics*, 2004.
- [56] M. P. Zaitlin and A. C. Anderson. Thermal conductivity of borosilicate glass. *Physical Review Letters*, 1974.
- [57] Rohit Verma, Mukesh Mishra, R. Dhar, and R. Dabrowski. Single walled carbon nanotubes persuaded optimization of the display parameters of a room temperature liquid crystal 4-pentyl-4cyanobiphenyl. *Journal of Molecular Liquids*, 2016.
- [58] 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*, 2012.

- 
- [59] David J. Griffiths and Colin Inglefield. Introduction to Electrodynamics . *American Journal of Physics*, 2005.
- [60] H. A. Ragheb, A. Sebak, and L. Shafai. Cutoff frequencies of circular waveguide loaded with eccentric dielectric cylinder. *IEE Proceedings: Microwaves, Antennas and Propagation*, 1997.