

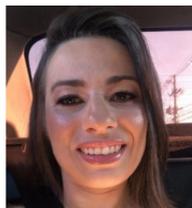
MODELAGEM DE MISTURAS BINÁRIAS PELA APLICAÇÃO DA EQUAÇÃO DE SCHRÖEDER-VAN LAAR A UM CONJUNTO DE SUBSTÂNCIAS COM DIVERSIDADE ESTRUTURAL



Ursula Paôla
Rudolph de
Matos



Luana
Dezingrini
Lopes



Ana Paula
Scheeren



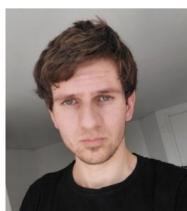
Juliana Maria
Forain Miolo
Schneider



Adailton João
Bortoluzzi



Helio Gauze
Bonacorso



Itamar Luís
Gonçalves



Aloir Antonio
Merlo

O artigo selecionado para capa nesta edição é do grupo do Prof. Aloir Antonio Merlo da Universidade Federal do Rio Grande do Sul. A arte da capa ilustra a modelagem teórica e experimental de misturas binárias eutéticas de cristais líquidos usando a equação de Schröder-van Laar. Veja o artigo na íntegra em <http://dx.doi.org/10.21577/0100-4042.20250017>.

Qual é a principal contribuição deste artigo?

O artigo descreve a modelagem teórica de 14 misturas binárias com o objetivo de previsão teórica do ponto de fusão usando a equação de Schröder-van Laar. No artigo foram simuladas e testadas as misturas de compostos orgânicos com ampla diversidade estrutural. Utilizando a modelagem e os dados experimentais o comportamento eutético foi analisado para as misturas binárias preparadas. Uma análise do comportamento foi realizada considerando as similaridades e as diferenças estruturais e eletrônicas dos compostos individuais que compõem as 14 misturas. O artigo também contribui na linha de atuação em ensino pela difusão do tema Cristal Líquido no ensino médio por meio do PROFQUI e da realização de pré-estágios de escolas profissionalizantes. Uma das co-autoras, durante o ano da vigência da pandemia (2021), desenvolveu e analisou todas as misturas como pré-requisito para obtenção do grau de Técnico em Química na Fundação Escola Técnica Liberato Salzano Vieira da Cunha.

Como foi idealizada a arte da capa?

A arte da capa foi idealizada usando as informações do artigo, com destaque para os elementos que identificam as mesofases de cristais líquidos no plano de fundo, consistindo na textura observada por microscopia óptica de luz polarizada (MOLP). A textura observada é formada por figuras geométricas descritas por Apolônio de Perga conhecidas como seções cônicas que interceptam um cone – círculo, elipse, parábola e a hipérbole. Essas seções cônicas estão presentes na mesofase esmetica A (SmA) e constituem os defeitos que são visíveis sob MOLP. Esse defeitos topológicos foram estudados em 1922 por Georges Friedel e caracterizam os domínios da textura focal cônica da mesofase SmA obtida da mistura UR4. O gráfico

teórico foi construído pela intersecção das curvas de Schröder-van Laar dos dois componentes da mistura. Por fim, são apresentadas as estruturas dos dois componentes da mistura binária UR4 usada para a obtenção da figura de fundo.

Como a ideia desta revisão surgiu?

A ideia do artigo surgiu do fato que misturas eutéticas de dois ou mais componentes são usadas em dispositivos de cristais líquidos presentes em telas planas de TV, de sensores ópticos e outros. O LaSOMI tem sintetizados uma coleção de muitos compostos líquido-cristalinos com diferentes mesofases e faixas de temperatura de mesofases acima da temperatura ambiente. Temperaturas acima da ambiente restringem o potencial de uso em mostradores de cristal líquido comerciais. Nesse sentido, iniciamos uma investigação de análise do comportamento térmico envolvendo a preparação de misturas binárias e determinação teórica e experimental do abaixamento da temperatura de fusão na mistura. A partir desse estudo inicial podemos ajustar as novas formulações pela seleção de novos componentes explorando as similaridades estruturais para reduzir o ponto de fusão da mistura eutética.

Quais são as perspectivas futuras para a linha de pesquisa?

A modelagem teórica usando a equação de van Laar está sendo usada em diferentes formulações binárias em duas linhas de investigação. A primeira está no detalhamento completo das misturas UR08, UR09 e UR10 descritas no artigo com variação nas frações molares dos componentes e análise das mesofases obtidas e das respectivas faixas de mesofases. Uma segunda investigação está direcionada para a preparação de misturas binária com componentes líquido-cristalinos e de cicloalutóis quirais derivados de terpenos sintetizados no LaSOMI. Essa investigação tem por objetivo a preparação de misturas eutéticas quirais e o estudo do comportamento mesomórfico em mesofases nemática quiral (N*) ou azul (Blue Phase, BP). Por fim, pretende-se modelar teoricamente misturas ternárias e quaternárias, selecionando os componentes a partir das ferramentas estatísticas, e a aplicação da equação de van Laar em sistemas de 3 ou 4 equações matemáticas.