



**UNIVERSIDADE FEDERAL DO VALE DO SÃO FRANCISCO**  
**CURSO DE PÓS-GRADUAÇÃO EM CIÊNCIA DOS MATERIAS**

Francisco da Silva Matias

Cosmologia dos Cristais Líquidos Nemáticos: Um Breve Estudo

Juazeiro-BA

2013



## **COLEGIADO DE PÓS-GRADUAÇÃO EM CIÊNCIA DOS MATERIAS - CPGCM - UNIVASF**

Francisco da Silva Matias

Cosmologia dos Cristais Líquidos Nemáticos: Um Breve Estudo

Trabalho apresentado a  
Universidade Federal do Vale do  
São Francisco – UNIVASF, campus  
Juazeiro, como requisito para  
obtenção do título de mestre em  
ciência dos materiais.

**Orientador:** Prof. Dr. Marcio Pazetti

Juazeiro-BA

2013

*Dedico este trabalho aos meus  
pais Cícero Matias dos Santos e  
Maria aparecida da Silva.*

*“A coisa mais bela que o homem pode experimentar é o mistério. É essa emoção fundamental que está na raiz de toda ciência e toda arte.”*

*Albert Einstein*

## SUMÁRIO

SUMÁRIO.....	5
<b>LISTAS DE FIGURAS .....</b>	<b>i</b>
<b>AGRADECIMENTOS .....</b>	<b>ii</b>
RESUMO.....	iii
<b>ABSTRACT.....</b>	<b>iv</b>
<b>INTRODUÇÃO .....</b>	<b>1</b>
<b>CAPÍTULO 1 .....</b>	<b>4</b>
<b>CRISTAIS LÍQUIDOS .....</b>	<b>4</b>
1.1 Um breve Histórico.....	4
1.2 Introdução aos Cristais Líquidos .....	7
1.3 Classificação Cristais Líquidos.....	9
1.3.1 Cristais líquidos Termotrópicos.....	9
1.3.2 Cristais líquidos Liotrópicos .....	13
<b>CAPÍTULO 2 .....</b>	<b>16</b>
<b>TEORIA CONTÍNUA DO ESTADO NEMÁTICO.....</b>	<b>16</b>
2.1 Equações hidrodinâmica dos nemáticos .....	16
2.1.2 Equações constitutivas .....	22
<b>CAPÍTULO 3 .....</b>	<b>35</b>
<b>TEORIA DA RELATIVIDADE GERAL.....</b>	<b>35</b>
<b>CAPÍTULO 4 .....</b>	<b>40</b>

<b>PARÂMETRO DE ORDEM</b> .....	40
4.1 Parâmetro de Ordem Macroscópico.....	41
4.2 Relação entre o Parâmetro de Ordem Macroscópico e Microscópico	43
4.3 Parâmetro de Ordem Elipsoidal .....	44
<b>CAPÍTULO 5</b> .....	50
<b>ELASTICIDADE E CURVATURA</b> .....	50
5.1 Curvatura em uma amostra de cristal líquido .....	50
5.1.1 Termodinâmica na Métrica .....	52
5.1.2 Conexões e Curvatura .....	55
5.2 Teoria elástica do contínuo .....	57
5.3 Defeitos topológicos em um cristal líquido .....	59
5.3.1 Configurações bidimensional e tridimensional do vetor diretor via energia livre de Frank .....	60
<b>CAPÍTULO 6</b> .....	68
<b>A EQUAÇÃO DE EINSTEIN DOS CRISTAIS LÍQUIDOS NEMÁTICOS</b> .....	68
6.1 Configurações bidimensional e tridimensional do vetor diretor via Relatividade geral .....	68
6.2 Configurações dinâmicas do vetor diretor .....	73
<b>CONCLUSÕES E PERSPECTIVAS FUTURAS</b> .....	81
<b>APÊNDICE</b> .....	82
<b>Tensores</b> .....	82
A.1 Transformação de Coordenadas.....	82

A.2	Vetor Covariante e Contravariante (Tensor de 1ª Ordem) .....	83
A.3	Tensor Contravariante de 2ª Ordem .....	85
A.4	Tensor Covariante de 2ª Ordem .....	85
A.5	Tensor Misto de 2ª Ordem .....	85
A.6	Conjugado do tensor simétrico.....	87
A.7	Tensor métrico e métrica Riemanniana.....	88
A.7.1	Tensor métrico covariante .....	88
A.7.2	Tensor métrico contravariante .....	89
A.8	Equação da Geodésica .....	90
A.9	Lei de transformação dos símbolos de Christoffel .....	95
A.10	Derivada Covariante.....	98
A.10.1	Derivada covariante de um vetor covariante .....	99
A.10.2	Derivada covariante de um vetor contravariante .....	101
A.11	Tensor de curvatura ou de Riemann-Christoffel.....	102
	<b>REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS .....</b>	<b>106</b>

## LISTAS DE FIGURAS

Figura 1.1: Arranjo molecular dos estados: (a) Sólido; (b) Cristal Líquido; (c) Líquido. [30]

Figura 1. 2: Ordem molecular em um cristal liquido [31].

Figura 1.3: Moléculas anisométricas: (a) Alongada; (b) Discótica. [20]

Figura 1.4: Fases Nemáticas: (a) Calamítica; (b) Discótica. [20]

Figura 1.5: Fases nemáticas: (a) Nemática biaxial; (b) Nemática colestérica. [20]

Figura 1.6: Fases Esmética: (a) Esmética A; (b) Esmética C. [33]

Figura 1.7: Molécula Anfifílica [33].

Figura 1.8: Micela [34].

Figura 1.9: Micela na fase nemática. (a) calamítico e (b) discóticos. [33]

Figura 1.10: Cristal líquido liotrópico na fase Lemelar [33].

Figura 5-1: Distorções em um cristal líquido nemático [44].

Figura 5-2: Foto da textura Schlieren em um cristal líquido nemático Utilizando a técnica de microscopia óptica de luz polarizada [55].

Figura 5-3: Orientação do vetor diretor ao longo de uma linha que faz um ângulo polar  $\alpha$  [41].

Figura 5-4: Possíveis configurações do vetor diretor.

Figura 5-5: Diretor no centro de uma declinação com  $s = +1$  [41].

Figura 5-6: Representação espacial do vetor diretor em termos de  $\theta$  e  $\varphi$  [44].

Figura 5-7: Configurações de Escape: (a)  $s = +1$  e  $c = \frac{\pi}{2}$  e (b)  $s = -1$  . [41]



## AGRADECIMENTOS

Primeiramente agradeço a Deus por ter me dado força de vontade e saúde na realização deste trabalho.

A toda minha família: Aos meus pais Cicero Matias dos Santos e Maria Aparecida da Silva pelo amor incondicional, paciência e dedicação em todos os momentos de minha vida e ao meu irmão, que é um exemplo a ser seguido, sempre esteve ao meu lado me dando apoio.

A minha namorada Maria de Fátima Souza Silva, pelo amor, compreensão e apoio ao longo da realização deste trabalho.

Ao meu orientador, Prof. Dr. Márcio Pazetti, por toda sua competência, dedicação, paciência, apoio e disponibilidade que mostrou ao longo deste trabalho.

Ao professor Manoel Simões Filho da Universidade Estadual de Londrina pela sua generosa contribuição. Pois foi embasado na sua teoria que este trabalho pode ser então desenvolvido.

A minha professora de Física do ensino médio Dilma Masceno que sempre acreditou em mim.

Aos meus amigos do curso de Física: Jorge Maurício, Newton Pionório, Jaderson Araújo, Cícero Thiago, Ericleiton Rodrigues, Francisco Miguel, André Romão, Francisco Júnior, Fabrízio Pórfirio.

Aos meus amigos de Mestrado: Denise Miranda, Renata Saldanha, Amanda Barbosa, Geciane Santos, Ariadne Pequeno, Ricardo Prates, Thiago Victor, Dona Zezé, Evando, Georgenes, Jorge Adriano, Paulo Henrique, João Paulo Cavalcante, Simone Araújo, Tairine Medrado, Kelly Priscila, Elisabete, Keyte, Aline, Marcelo Santos, Ginetton Tavares, Jacinto.

Aos professores: Dr. Télió Nobre, Dr. Wagner Passos, Dr. Aníbal Livramento, Dr. Nikifor Rakov, Dr. Helinando Pequeno.

A CAPES pelo apoio financeiro.

## RESUMO

A proposta deste trabalho é encontrar soluções, a partir da equação de Einstein dos cristais líquidos, que possam descrever as configurações do vetor diretor em torno de defeitos topológicos contidos em uma amostra de cristal líquido nemático. Para encontrar essas soluções, fizemos uma analogia com o que é feito na teoria da relatividade geral, em que o tensor energia momento é considerado nulo para uma região que não contenha massa e, a partir de então, consideramos na equação de Einstein dos cristais líquidos o tensor stress nulo. Para tal finalidade, utilizamos o caso particular das componentes do vetor diretor bidimensional com uma estrutura planar e, usando estas componentes na equação de Einstein dos cristais líquidos, chegamos à equação que descreve as configurações estáticas do diretor ao redor dos defeitos. Para esse caso, essas configurações estão relacionadas a uma torção (twist). As componentes tridimensionais do vetor diretor estão relacionadas com estruturas finas capilares, onde o diretor tende abandonar a configuração de uma estrutura planar para uma terceira dimensão. Usando estas componentes na equação de Einstein dos cristais líquidos, chegamos à equação que descreve as configurações estáticas do vetor diretor escape (vetor diretor escapando para uma terceira dimensão), sendo que essa configuração, esta relacionada com os termos Bend (curvar) e Splay (afunilar). Neste trabalho, propomos um termo correspondente ao tempo no escalar de curvatura (solução da equação da equação de Einstein dos cristais líquidos) para torna-lo quadrimensional. Resolvendo este escalar de curvatura por meio das componentes do vetor diretor, que passam agora também a depender do tempo, iremos obter as equações que possibilita a descrição das configurações dinâmicas do diretor em torno dos defeitos. As equações que descrevem as configurações de defeitos dinâmicos e estáticos apresentados nesta dissertação apresentam semelhança com as que são encontradas na teoria contínua dos cristais líquidos nemáticos.

**Palavras-chave:** Cristais líquidos nemáticos. Dinâmica do vetor diretor. Equação de Einstein dos cristais líquidos.

## ABSTRACT

The proposal of this work is to find solutions from the Einstein equation of liquid crystals, which can describe the settings of direction vector around topological defects contained in a sample of nematic liquid crystal. To find these solutions, we made an analogy with what is done in the theory of general relativity, in which the energy momentum tensor is void for a region that contains no mass, and thereafter, we consider the Einstein equation of liquid crystals the stress tensor null. For this purpose, we used the particular case of two-dimensional direction vector components with a planar structure, and using these components in Einstein's equation of liquid crystals, we come to the equation that describes the static configurations of the director around the defects. For this case, these settings are related to a twist (twist). The three-dimensional components of the direction vector are related with fine structures capillaries, where the director tends to leave the configuration of a planar structure to a third dimension. Using these components in Einstein's equation of liquid crystals, we come to the equation that describes the static settings of the escape direction vector (direction vector escaping into a third dimension), and this configuration is related to the terms Bend and Splay. In this paper, we propose a term corresponding to the time the scalar curvature (equation solution of the Einstein equation of liquid crystals) to make it four-dimensional. Solving this scalar curvature through the components of the direction vector, which are now also depend on time, we will obtain the equations that allows the description of dynamic configurations of the director around the defects. The equations that describe the configuration of dynamic and static defects presented in this thesis show similarity with those found in the continuous theory of nematic liquid crystals.

**Key-words:** Nematic liquid crystals. Dynamic vector director. Einstein equation of liquid crystals.

## INTRODUÇÃO

O cristal líquido nemático é um estado em que as substâncias possuem características de fluir, como um líquido isotrópico, e ordem orientacional de longo alcance, presente na maioria dos sólidos cristalinos. Mas esse sistema geralmente apresenta irregularidades no seu estado de ordenamento que são conhecidos como defeitos topológicos [1].

Esses defeitos topológicos presente em cristais líquidos nemáticos são formados quando ocorre a quebra de simetria da fase isotrópica em uma transição fase isotrópico-nemática.

Os defeitos topológicos surgiram em transições de fase no universo primitivo, e suas propriedades dependem dos detalhes particulares da quebra espontânea de simetria que os geram. O conceito de simetria está diretamente relacionado com o conceito de isometria, assim como suas operações geométricas associadas de reflexão, rotação e translação [2]. De forma geral, pode-se dizer que um sistema é simétrico se o mesmo não muda as suas características e propriedades frente a alterações dos parâmetros que o descrevem.

Do ponto de vista tecnológico industrial, os defeitos topológicos comprometem a qualidade das imagens dos mostradores de cristal líquido devido ao espalhamento da luz. Assim, é interessante, tanto do ponto de vista tecnológico quanto científico, o estudo da dinâmica dos defeitos topológicos com finalidade de reduzi-los [1].

Nos últimos anos, alguns estudos teóricos relacionados a amostras de matéria condensada [3,4] foram realizados utilizando cristais líquidos. As características cosmológicas inacessíveis como os defeitos topológicos presentes no universo primitivo, são semelhantes aos defeitos encontrados em uma amostra de cristal líquido.

Partindo desse pressuposto, as equações que descrevem as texturas de cristais líquidos as e equações do campo gravitacional do setor espacial que é descrita pela relatividade geral, são bastante semelhantes. Como ambas as

teorias são equivalentes, aplica-se a mesma ferramenta matemática para as equações da física dos cristais líquidos nemáticos, os tensores. Assim sendo, pode-se obter uma curvatura escalar intrínseca tridimensional não nula conectada com as texturas de uma amostra nemática.

Por meio do escalar de curvatura, chega-se a mesma a uma equação que descreve as configurações do vetor diretor em torno dos defeitos presentes numa amostra de cristal líquido. Esses mesmos defeitos são obtidos utilizando as equações da teoria contínua estática dos nemáticos, tanto para o caso bidimensional, quando para o tridimensional.

O presente trabalho tem como objetivo de introduzir um termo a mais no escalar de curvatura correspondente ao tempo tornando-o quadrimensional.

O escalar de curvatura quadrimensional proposto é baseado na teoria dinâmica dos cristais líquidos nemáticos.

Esta dissertação está organizada da seguinte forma:

No capítulo 1 é apresentado um breve histórico sobre os cristais líquidos e a sua importância para o desenvolvimento tecnológico e biológico. São abordados também as principais fases líquido-cristalinas e parâmetro de ordem escalar, onde este descreve uma transição de fase.

No capítulo 2 será apresentada a teoria contínua cristais líquidos nemáticos. Ao longo dos anos, vários modelos foram propostos para descrever essa teoria, dentre entre eles se destacam o modelo de Erickson-Leslie [5-7], o de conexão afim de Hess [8-11] e o modelo cinético de Doi [12-15].

É nesta teoria que é estudado o comportamento dos cristais líquidos nemáticos por meio de equações hidrodinâmicas, com base apenas no modelo de Erickson-Leslie.

No capítulo 3 serão apresentados alguns fundamentos da relatividade geral que é bastante relevante para esse trabalho.

No capítulo 4 será discutida e definida a relação entre os parâmetros de ordem macroscópico e microscópico. E na sequência, é apresentado um embasamento teórico para definição do parâmetro de ordem elipsoidal.

No capítulo 5 é apresentada conceitualmente que as texturas dos cristais líquidos nemáticos têm associada uma superfície com uma curvatura intrínseca. As variações do vetor diretor ao redor de um defeito do tipo linha (declinações) estão relacionadas com a elasticidade da amostra de cristal líquido [16]. Pela teoria contínua, serão obtidas as equações estáticas e dinâmicas que descreve os defeitos topológicos.

No capítulo 6 iremos obter as configurações estáticas e dinâmicas do vetor diretor resolvendo a equação de Einstein dos cristais líquidos nemáticos. Será proposto um escalar de curvatura quadrimensional. E por fim, serão apresentadas as conclusões e as perspectivas futuras.

## **CAPÍTULO 1**

Este capítulo faz uma breve discursão da história dos cristais líquidos que foram ganhando importância ao longo do tempo. Por meio de estudos de alguns pesquisadores, sendo que alguns deles ganharam um prêmio Nobel, essa nova fase da matéria (cristais líquidos) é responsável pelo avanço tecnológico e é dividida em dois grandes grupos que serão apresentados com maiores detalhes ao longo do texto.

### **CRISTAIS LÍQUIDOS**

Os cristais líquidos, desde a sua descoberta, têm despertado interesses de alguns pesquisadores devido à possibilidade de aplicações tecnológicas como, por exemplo, em mostradores digitais e sensores de temperaturas. Eles apresentam grande importância na pesquisa básica em físico-química e em aplicações biológicas, onde os cristais líquidos podem mudar significativamente a velocidade de liberação de fármacos, aumentando solubilidade, absorção e controle no organismo [17].

#### **1.1 Um breve Histórico**

A primeira descrição de um cristal líquido foi feita pelo botânico Friedrich Reinitzer em 1888. Segundo suas observações, uma molécula conhecida como benzoato de colesterila tinha dois pontos de fusão distintos (145,5 °C e 178,5 °C) [18]. A temperatura ambiente, ela apresentava aparência sólida cristalina, e quando aquecidas, se transformavam num fluido leitoso, e ao manter o aquecimento, voltava a mudar de aparência, desta vez para um líquido transparente. Essas constatações foram feitas quando ele pesquisava a função do colesterol das plantas. Suspeitando que o fenômeno observado pudesse ser devido a impurezas no material, Reinitzer enviou amostras ao físico Otto Lehmann o qual, para descobrir as possíveis impurezas, fez um estudo criterioso utilizando um microscópio de luz polarizada e verificou que, com variação da temperatura, esta substância, apesar de líquida, apresentava

características ópticas de um sólido como a birrefringência, em que o mesmo denominou de cristal líquido [18].

A comunidade científica, no entanto, na época da descoberta do cristal líquido, não aceitava a idéia de uma substância possuir mais de um ponto de fusão. Os químico-físicos Gustav Tammann e Quincke deram uma explicação do fenômeno observado por Lehmann, no qual os cristais líquidos eram na verdade coloides, pois estes são constituídos de componentes sólidos devido às impurezas.

Outra explicação também foi dada por Walther Nernst, que viria ganhar o premio Nobel em 1916 pela terceira lei da termodinâmica. Segundo ele, em vez de ser um coloide, o fenômeno observado era devido a uma suspensão de gotículas de um líquido em outro. Em virtude de muitas especulações do fenômeno observado, Lehmann e o químico-físico Rudolf Schenck realizaram criteriosos experimentos com a finalidade de provar que os cristais líquidos utilizados eram materiais de alto grau de pureza [18].

Foi no encontro da Sociedade Alemã de Química realizado em 3 de junho de 1905, que encerrou as ideias contraditórias sobre a existência dos cristais líquidos e a partir de então, começaram a existir grupos de pesquisadores interessados em estudar essa nova fase da matéria.

Em 1922, o francês George Friedel publica um trabalho que descreve as diferentes fases de um cristal líquido no qual os classifica em nemáticos, esméticos e coletéricos [19].

O encontro realizado em abril de 1933 no *Royal Society of Chemistry* [20], foi marcado pelo debate entre os teóricos do “aglomerado” representado por Leonard Orstein e Wilhelm Kast e teóricos da “distorção” Carl Wilhelm Oseen [21] e Hans Ernest Zocher [22].

Os teóricos do “aglomerado” postularam a existência de aglomerados de moléculas alinhadas como explicação para as características anisotrópicas apresentadas nas fases líquido-cristalinas, enquanto que os teóricos da “distorção” só observavam a anisotropia óptica [23,24].

Os trabalhos realizados por Ossen com as médias de grandezas que caracterizam a estrutura microscópica dos cristais líquidos é conhecida atualmente como teoria contínua [21]. Seu aluno, Adolf Anzelius desenvolveu a



teoria hidrodinâmica para a fase nemática, que apesar de conter alguns erros, serviu de base para a teoria de Ericksen-Leslie [20].

Em 1961, era formulada pela primeira vez a teoria microscópica, por dois físicos alemães, Wilhelm Maier e Alfred Saup, que relaciona as características moleculares com as fases líquido-cristalinas [23,25].

No ano de 1962, George Gray publica um trabalho completo [18] sobre os cristais líquidos, em que apresenta grandes contribuições no estudo dos polímeros – cristais líquidos macromoleculares. Nesta mesma época, o britânico Charles Frank, baseado nos trabalhos de Oseem [21] e Zocher [22], inicia a teoria da física moderna dos cristais líquidos onde [26] James Fergason, engenheiro da Westinghouse, aplicou essa teoria na construção de termômetro de cristal líquido e patenteando-a em 1963 [20].

No final da década 60, um grupo de pesquisadores da RCA (*Radio Corporation America*) teve a idéia de utilizar cristais líquidos em monitores de TV de raios catódicos, mas eles não contavam com a rejeição da RCA por achar essa ideia inviável e o grupo se desfez. Um dos integrantes do grupo, Wolfgang Helfrich no início da década de 70, em parceria com Schadt, patentearam a idéia de utilizar os cristais líquidos nemáticos torcidos (twist) em mostradores [27]. A fase nemática, não possuía uma temperatura não muito agradável numa sala de estar de TV, mas usufruindo do trabalho de George Gray e tirando proveito da termodinâmica fundamental (a regra de Gibbs), consegue elaborar misturas de cristais líquidos cuja fase nemática se encontra entre 9 graus negativos e 59 positivos [27].

Em 1991, De Gennes ganhou o prêmio Nobel mostrando que métodos usados para estudar a ordem dos fenômenos em sistemas simples podem ser generalizados para sistemas complexos da matéria, como por exemplo, os cristais líquidos [23, 27,28].

Percebe-se, assim, com o passar do tempo, desde a sua descoberta, a nova fase da matéria foi ganhando uma atenção mais especial entre teóricos e experimentais, devido a sua grande aplicação tecnológica.

Na próxima seção vamos fazer uma explanação dos sólidos cristalinos, líquidos isotrópicos e cristais líquidos, com finalidade de se obter associada a

cada fase, uma grandeza escalar chamada de parâmetro de ordem e que é obtida em relação a uma direção preferencial das moléculas de cada fase.

## 1.2 Introdução aos Cristais Líquidos

Na natureza a matéria se encontra agregada em diferentes formas que dependem de arranjos moleculares influenciáveis pela temperatura na qual, as mais comuns são sólido, líquido e gasoso.

Nos sólidos cristalinos as moléculas não se distribuem aleatoriamente e ocupam lugares específicos, os eixos moleculares apontam em direções específicas formando uma estrutura unitária, idêntica e periodicamente repetida. Como as moléculas são ordenadas, elas possuem um estado pouco simétrico e eles apresentam ordem translacional e rotacional de longo alcance [29].

Nos líquidos ou líquidos isotrópicos, as moléculas se distribuem quase aleatoriamente de modo a formar um estado quase desordenado e, portanto, simétrico. Eles são espacialmente homogêneos e rotacionalmente isotrópicos onde suas propriedades são invariantes com respeito às translações através de qualquer vetor posição e rotações arbitrárias sobre qualquer eixo.

Embora existam outras substâncias que apresentam estados diferentes dos já citados anteriormente, o cristal líquido é um exemplo, que apresenta propriedades mecânicas presentes nos líquidos como, fluidez, resistência à baixa tensão e propriedades mecânicas presentes em sólidos cristalinos como susceptibilidade magnética e índice de refração, sendo assim o cristal líquido é uma fase da matéria que apresenta um comportamento intermediário entre um sólido e um líquido [30] (ver figura 1.1).

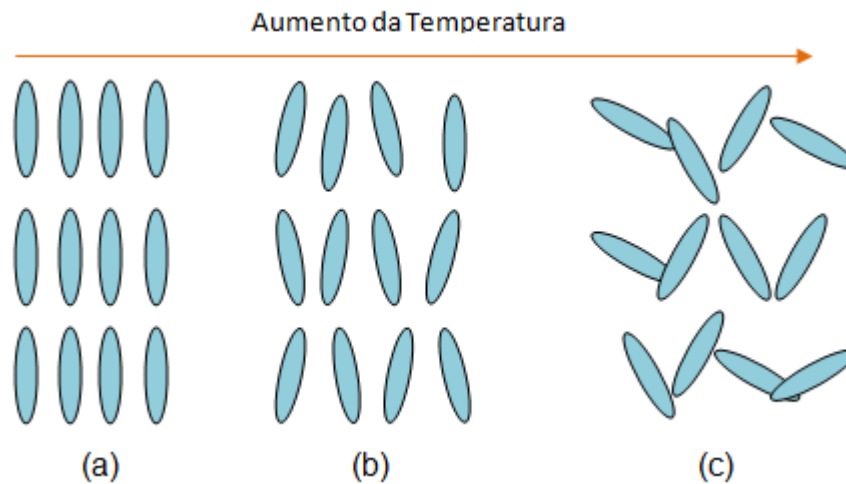


Figura 1.1: Arranjo molecular dos estados: (a) Sólido; (b) Cristal Líquido; (c) Líquido. [30]

A ordem orientacional e posicional dos cristais líquidos são menores nos sólidos cristalino e maior nos líquidos isotrópicos, onde estes, não apresentam ordem preferencial. As moléculas dessa nova fase da matéria apresentam a tendência de se orientar ao longo de um eixo que é chamado de vetor diretor e denotado por um vetor unitário  $\mathbf{n}$  [31] (ver figura 1.2).



Figura 1.2: Ordem molecular em um cristal líquido [31].

É importante destacar na figura 1.2, que as moléculas não apresentam um sentido preferencial, onde  $\mathbf{n}$  e  $-\mathbf{n}$  são equivalentes [32]. O grau de alinhamento médio das moléculas de uma amostra de cristal líquido, dependente da temperatura, é medido por um parâmetro de ordem escalar,

que também é chamado de parâmetro de ordem microscópico, o qual pode ser obtido por meio do cálculo médio do segundo polinômio de Legendre ( $P_2$ ), isto é,

$$S = \frac{1}{2} \langle 3\cos^2\theta - 1 \rangle = \langle P_2(\cos\theta) \rangle \quad (1.1)$$

onde  $\theta$  é o ângulo entre cada eixo simétrico (eixo maior da molécula) e o vetor diretor. Com esse parâmetro de ordem, pode-se fazer a distinção entre a fase mais ordenada e a fase menos ordenada. No estado sólido todas as moléculas se encontram alinhadas, o ângulo  $\theta$  terá um valor nulo ( $\theta = 0$ ), e teremos um valor de  $S \approx 1$ . No estado líquido as moléculas estão distribuídas randomicamente, logo o ângulo  $\theta$  pode assumir qualquer valor com probabilidades iguais, tendo que  $S \approx 0$ . Para a fase cristal líquida o parâmetro de ordem microscópico ( $S$ ) assume valores intermediários entre 0 (*zero*) e 1 (*um*).

A próxima seção é dedicada especialmente à classificação das fases dos cristais líquidos e aplicação destes.

### 1.3 Classificação Cristais Líquidos

A classificação dos cristais líquidos é feita de acordo com seus arranjos moleculares e as transições de fases observadas. Eles são divididos em dois grandes grupos, os *Termotrópicos* e os *Liotrópicos*, que serão discutidos nas próximas subseções.

#### 1.3.1 Cristais líquidos Termotrópicos

Os cristais líquidos termotrópicos são aqueles em que as transições de fases ocorrem com função da temperatura. Os termotrópicos são substâncias orgânicas formadas por moléculas anisométricas, ou seja, alongadas ou em forma de discos [30] (ver figura 1.3).

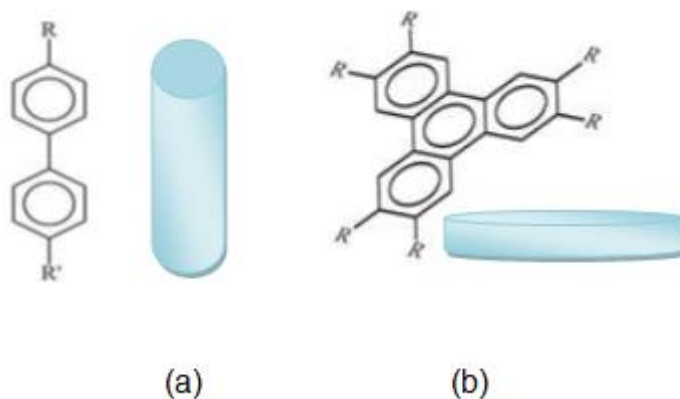


Figura 1.3: Moléculas anisométricas: (a) Alongada; (b) Discótica. [20]

Como foi apresentado inicialmente, G. Friedel classificou as fases dos cristais líquidos de acordo com sua simetria, estrutura e ordem molecular em: **Nemáticos, Colestéricos e Esméticos.**

As três principais mesofases dos nemáticos são: uniaxial, biaxial e quiral.

A fase nemática uniaxial é caracterizada por possuir apenas uma direção preferencial em relação ao vetor diretor e encontram-se com seus centros de massa distribuídos aleatoriamente, isto é, não possui ordem posicional de longo alcance, mas apresentando uma ordem orientacional. Se as suas moléculas forem alongadas (prolatas) temos a fase nemática calamítica e se for achatadas (oblatas) temos a fase nemática discótica [30] (ver figura 1.4).

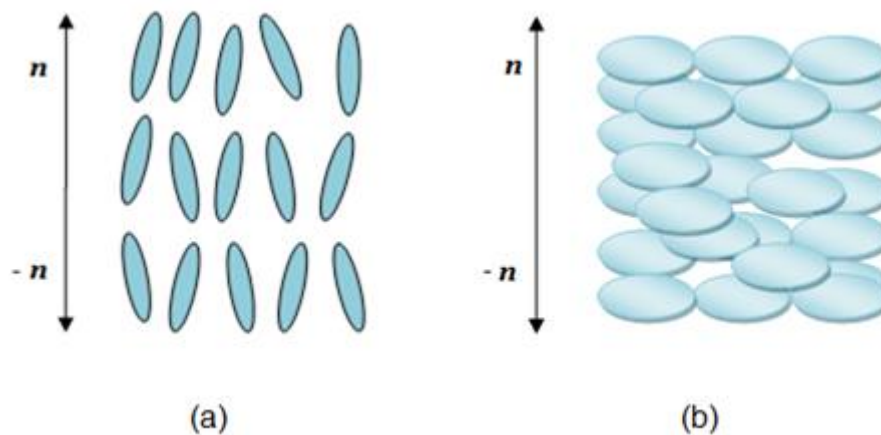


Figura 1.4: Fases Nemáticas: (a) Calamítica; (b) Discótica. [20]

A fase nemática biaxial possui duas direções preferenciais, uma perpendicular ao diretor e outra paralela ao mesmo (ver figura 1.5a).

Na fase nemática quiral ou colestérica, composta por carbonos quirais, o vetor diretor gira em torno de um eixo perpendicular (eixo de torção) descrevendo uma estrutura helicoidal (ver figura 1.5b). Quando ele der uma volta completa ao longo do eixo de torção (twist) a distância percorrida é chamada de passo do colestérico.

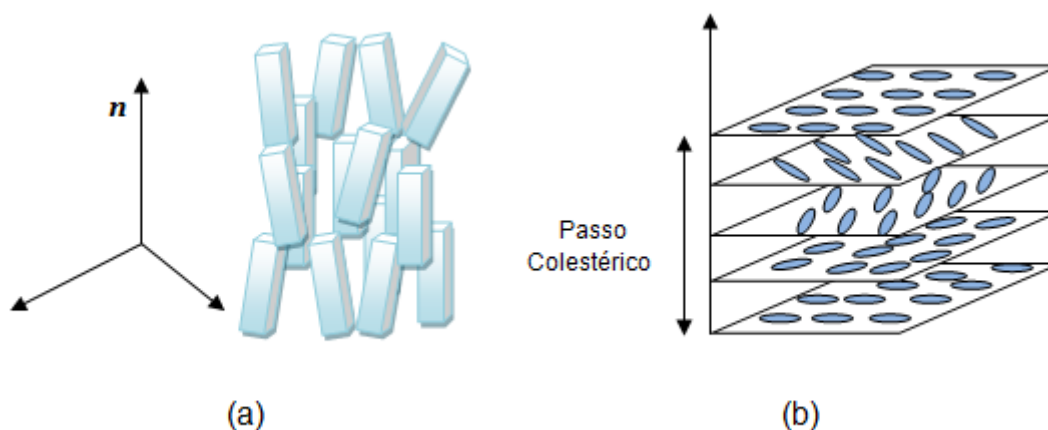


Figura 1.5: Fases nemáticas: (a) Nemática biaxial; (b) Nemática colestérica. [20]

Os nemáticos apresentam uma característica peculiar quando estão sujeitos a um campo elétrico, as moléculas tendem a girar facilmente devido a um torque, ficando paralela ao campo elétrico. Essa facilidade de resposta encontrada neles é à base de funcionamento dos displays de cristal líquido (LCD) [27].

A fase esmética possui um ordenamento maior quando comparada com a nemática. As moléculas desta fase estão organizadas em forma de camadas paralelas entre si e separadas por uma distância bem definida, sendo que orientação destas é feita com os seus eixos de simetria em relação aos planos paralelos das camadas e que se encontram perpendiculares a estes. Mas por outro lado, as moléculas não apresentam ordenamento posicional porque podem ter seus centros de massa distribuídos aleatoriamente dentro das camadas. Devido a essas diferentes orientações, surgem diferentes tipos de esméticos, como: Esmético A e Esmético C [1].

Na fase esmética A, suas moléculas são orientadas perpendicularmente as camadas com os centros de massa distribuídos dentro das mesmas (ver figura 1.6a). A fase esmética C possui uma estrutura semelhante a anterior, mas suas moléculas apresentam certa inclinação de um ângulo  $\theta$  em relação ao plano das camadas (ver figura 1.6b) [27].

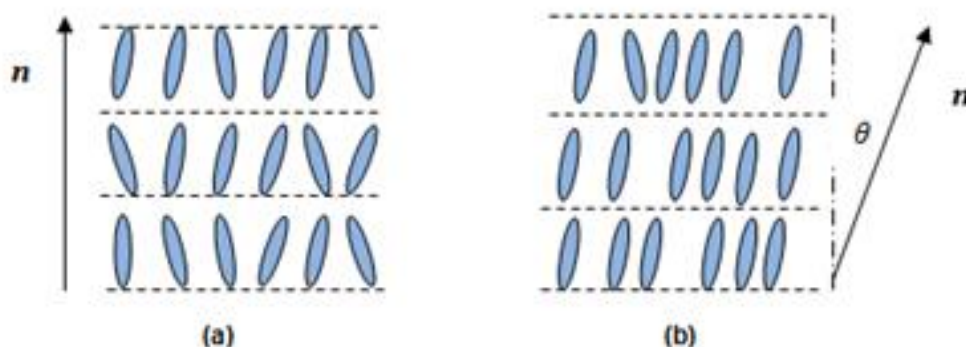


Figura 1.6: Fases Esmética: (a) Esmética A; (b) Esmética C. [20]

### 1.3.2 Cristais líquidos Liotrópicos

Os cristais líquidos liotrópicos são substâncias homogêneas obtidas a partir de misturas de um solvente, geralmente água, um soluto e um surfactante. As transições de fases nos liotrópicos podem ocorrer devido às variações de concentrações dos constituintes desta mistura, de temperatura e pressão [33].

O soluto é formado por moléculas anfifílicas sendo que a mesma é composta por uma parte polar que apresenta uma “cabeça” (hidrofílica) ligada a uma ou mais caudas (hidrofóbica) de cadeia carbônica, formando a parte apolar (ver figura 1.7). Um exemplo de uma molécula que contém essa dupla afinidade é a do sal de laurato de potássio [34].

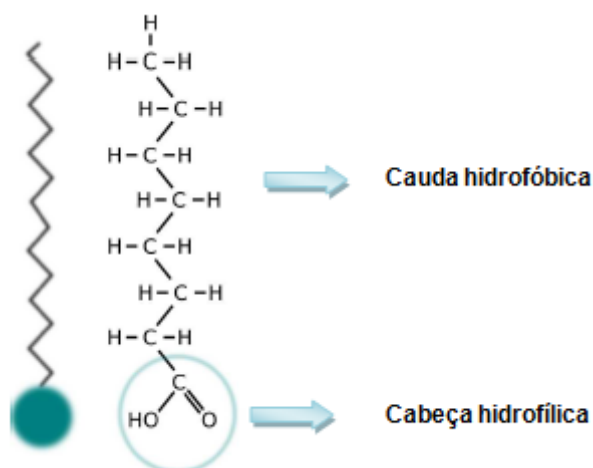


Figura 1.7: Molécula Anfifílica [33].

Quando o soluto é misturado na água com um surfactante, que é um agente que diminui a tensão superficial de outros líquidos sendo este uma molécula lipídica, as moléculas anfifílicas tendem a formar estruturas chamadas de micelas (ver figura 1.8). Estas são os constituintes básicos dos cristais líquidos liotrópicos.



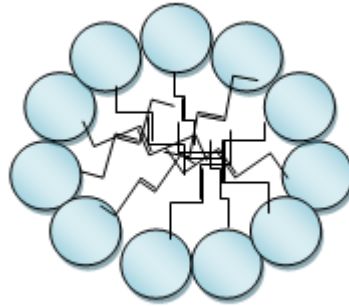


Figura 1.8: Micela [34].

Dependendo do tipo de simetria apresentada pelas micelas, as fases dos liotrópicos possuem uma classificação semelhante com os termotrópicos, ou seja, nemática, lamelar e colestérica.

Na fase nemática, se as micelas possuírem um formato cilíndrico tem a fase calamítica (ver figura 1.9a), mas se tiverem uma forma de disco à fase será chamada de discótica [35,36] (ver figura 1.9b).

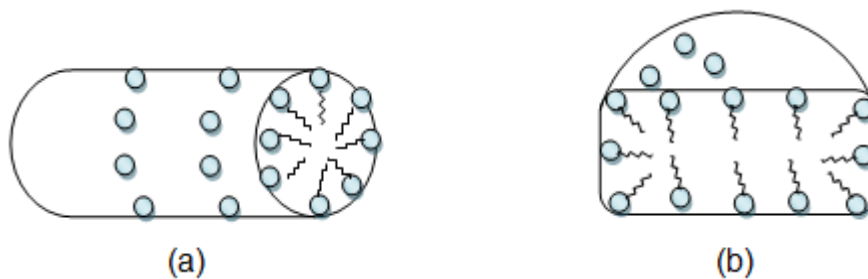


Figura 1.10: Micela na fase nemática. (a) calamítico e (b) discóticos. [33]

Na fase lamelar, as moléculas anfifílicas formam bicamadas intercaladas por água (ver figura 1.10), estas estruturas estão presentes em todos os seres vivos [37]. Esta fase é equivalente a esméctica nos termotrópicos.

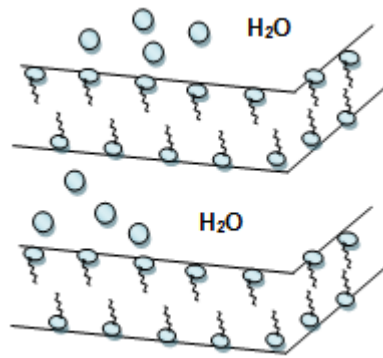


Figura 1.9: Cristal líquido liotrópico na fase Lemelar [34].

Os cristais líquidos liotrópicos compõem protótipos que são utilizados como um sensor de vibrações para detectar batimentos cardíacos, e também podem ser aplicados em equipamentos como sismógrafos ou dispositivos de segurança [38].

Neste capítulo foi dada uma visão geral sobre os cristais líquidos, onde foram apresentadas as duas classes existentes: termotrópicos e liotrópicos. Classificamos as mesofases líquido-cristalinas e apresentamos as suas aplicações, enfatizando as diferenças entre elas. Neste trabalho todos os cálculos feitos são com respeito a penas a fase nemática.

## **CAPÍTULO 2**

Neste capítulo, serão discutidos inicialmente sob quais circunstâncias os cristais líquidos nemáticos podem ser considerado como meios contínuos e no decorrer do texto, serão deduzidas as equações estática e dinâmica que descrevem o comportamento dos nemáticos, e elas serão obtidas com base no movimento de um líquido isotrópico e do vetor diretor.

### **TEORIA CONTÍNUA DO ESTADO NEMÁTICO**

Em um meio nemático ideal todas as moléculas estão alinhadas uniformemente. Mas em uma situação real, esse alinhamento deixa de ser uniforme devido à ação de campos externos (elétrico e magnético) e cada grupo local de moléculas de uma amostra de cristal líquido nemático está alinhado ao longo de uma direção preferencial, ocasionando distorções no alinhamento devido a diferentes orientações moleculares, ou seja, o parâmetro de ordem escalar varia em cada ponto desta amostra. Essa variação ocorre em distâncias bem maiores que as dimensões moleculares, de maneira que podemos considerar como um meio contínuo [39]. Na seção a seguir, apresentada de forma resumida as equações dinâmicas dos cristais líquidos nemáticos.

#### **2.1 Equações hidrodinâmica dos nemáticos**

Nesta seção vamos estudar o comportamento dos cristais líquidos nemáticos causados por perturbações, onde estas são descritas por equações hidrodinâmicas. A propagação dessas perturbações nas correntes e densidades locais corresponde à conservação da massa, do momento linear, momento angular e da energia [40].

Ao longo do estudo dos cristais líquidos vários modelos foram propostos para tratar a hidrodinâmica dos nemáticos, entre eles se destacam, o modelo de Erickson-Leslie, que sem quaisquer detalhes microscópicos é baseado nas

equações de movimento de um fluido isotrópico e na equação de movimento do vetor diretor [5-7]; o modelo de conexão afim de Hess, que faz o uso de uma transformação afim para deformar os potenciais esféricos presentes nos fluidos isotrópicos para potenciais elipsoidais presentes em fluidos com características anisotrópicas [8-11] e o modelo cinético de Doi descreve a viscosidade anisotrópica de um nemático [12-15]. Neste trabalho é abordado apenas o primeiro modelo.

Em cada lei da conservação será levada em consideração um sistema cartesiano num referencial inercial, isto é, referenciais onde as leis do movimento de Newton são válidas. Será utilizada a notação tensorial Einstein ou indicial [41]. A vírgula denota diferenciação parcial com respeito a coordenadas de espaço e a diferenciação temporal é representada por um ponto sobre a grandeza física. Como por exemplo,

$$T_{,i} = \frac{\partial T}{\partial x_i}, v_{i,j} = \frac{\partial v_i}{\partial x_j} \text{ e } \dot{T} = \frac{\partial T}{\partial t}$$

Para  $x_i$  ou  $x_j$  tem  $(x_1, x_2, x_3)$  correspondente a  $(x, y, z)$ , onde  $i, j = 1, 2, 3$ .

Considera-se o cristal líquido na fase nemática como um meio incompressível ( $v_{i,i} = 0$ , onde  $v_i$  é a velocidade linear) com uma temperatura constante ( $T_{,i} = \dot{T} = 0$ ) e termicamente isolado, isto é, não há trocas de calor. Será considerado que o vetor unitário ( $n_i n_i = 1$ ) tem uma magnitude constante e um alinhamento espontâneo devido às interações moleculares serem mais fortes do que forças externas e campos. Estas condições apresentadas anteriormente são válidas para todos os fenômenos estáticos e dinâmicos deste capítulo.

A conservação das leis é apresentada da seguinte forma [41]:

- Conservação da massa

$$\frac{d}{dt} \int_V \rho dV = 0 \quad (2.1)$$

onde  $\rho$  é a densidade de matéria do fluido.

- Conservação do Momento linear

$$\frac{d}{dt} \int_V v_i \rho dV = \int_V f_i dV + \int_A \sigma_{ji} dA_j \quad (2.2)$$

onde  $f_i$  é a força por unidade de volume e  $\sigma_{ji}$  é o tensor stress.

- Conservação do Momento angular

$$\frac{d}{dt} \int_V \epsilon_{ijk} x_j v_k \rho dV = \int_V \epsilon_{ijk} x_j f_k dV + \int_A \epsilon_{ijk} x_j t_k dA \quad (2.3)$$

onde  $\epsilon_{ijk}$  é conhecido como símbolo de Levi Civita [44] e  $t_k$  é a força por unidade de área ou vetor stress que pode ser escrita em termos de suas componentes, isto é,  $t_k = \sigma_{jk} \mathbf{v}_j$ , onde  $\mathbf{v}_j$  é o vetor unitário ao longo da normal saindo da superfície  $A$ .

- Conservação da energia

$$\frac{d}{dt} \int_V E dV = \int_V v_i f_i dV + \int_A v_i t_i dA \quad (2.4)$$

onde  $E$  é energia por unidade de volume.

O conjunto de equações apresentadas descreve apenas o comportamento de fluidos isotrópicos [37], onde estes não apresentam ordem orientacional e posicional. Para descrever o comportamento dos cristais líquidos nemáticos, é necessário introduzir o movimento orientacional do vetor diretor nas equações (2.3) e (2.4) [6]. Reescrevendo essas equações chega-se respectivamente a,

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \int_V (\rho \epsilon_{ijk} x_j v_k + \rho_1 \epsilon_{ijk} n_j \dot{n}_k) dV \\ = \int_V (\epsilon_{ijk} x_j f_k + \epsilon_{ijk} n_j G_k) dV + \int_A (\epsilon_{ijk} x_j t_k + \epsilon_{ijk} n_j S_k) dA \end{aligned} \quad (2.5)$$

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \int_V \left( U + \frac{1}{2} \rho v_i v_i + \frac{1}{2} \rho_1 \dot{n}_i \dot{n}_i \right) dV \\ = \int_V (v_i f_i + G_i \dot{n}_i) dV + \int_A (v_i t_i + S_i \dot{n}_i) dA \end{aligned} \quad (2.6)$$

onde  $\rho_1$  possui dimensão de momento de inércia por unidade de volume,  $U$  é a energia interna por unidade de volume,  $S_i = \pi_{ji} v_j$  é à força de superfície sobre o diretor (com dimensão de torque por unidade área) e  $G_i$  é à força de corpo externo sobre diretor (com dimensão de torque por unidade de volume).

Completando o conjunto de equações anteriormente descritas, J.L Ericksen [5] utilizou a equação de Oseen [38] para inserir a força de volume interna  $g_i$  sobre o vetor diretor na equação da conservação do momento angular, ou seja:

$$\frac{d}{dt} \int_V \rho_1 \dot{n}_i dV = \int_V (G_i + g_i) dV + \int_A \pi_{ji} dA_j \quad (2.7)$$

Fazendo o uso do teorema da divergência [44] nas equações (2.2), (2.6) e (2.7) para transformar as integrais de superfície em integrais de volume, obtemos respectivamente:

$$\frac{d}{dt} \int_V v_i \rho dV = \int_V f_i dV + \int_V \sigma_{ji,j} dV \quad (2.8)$$

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \int_V \left( U + \frac{1}{2} \rho v_i v_i + \frac{1}{2} \rho_1 \dot{n}_i \dot{n}_i \right) dV \\ = \int_V (v_i f_i + G_i \dot{n}_i) dV + \int_V (v_i t_i + S_i \dot{n}_i)_{,j} dV \end{aligned} \quad (2.9)$$

$$\frac{d}{dt} \int_V \rho_1 \dot{n}_i dV = \int_V (G_i + g_i) dV + \int_V \pi_{ji,j} dV \quad (2.10)$$

As equações (2.1), (2.8), (2.9) e (2.10) podem ser escritas respectivamente na forma diferencial [42]:

$$\dot{\rho} = 0 \quad (2.11)$$

$$\rho \dot{v}_i = f_i + \sigma_{ji,j} \quad (2.12)$$

$$\dot{U} = \sigma_{ji} d_{ij} + \pi_{ji} N_{ij} - g_i N_i \quad (2.13)$$

$$\rho_1 \ddot{n}_i = G_i + g_i + \pi_{ji,j} \quad (2.14)$$

Fazendo o uso da (2.13) Ericksen mostrou a seguinte relação:

$$\sigma_{ji} - \pi_{kj}n_{i,k} + g_j n_i = \sigma_{ij} - \pi_{ki}n_{j,k} + g_i n_j \quad (2.15)$$

O termo  $d_{ij}$  é um tensor simétrico que descreve a taxa de fluxo rotacional (taxa de tensor tensão), sendo definido por:

$$d_{ij} = \frac{1}{2}(v_{i,j} + v_{j,i}) \quad (2.16)$$

Os termos  $N_i$  e  $N_{ij}$  são interpretados como a velocidade angular do vetor diretor em relação ao fluido, sendo definido respectivamente por:

$$N_i = \dot{n}_i - W_{ij}n_j \quad (2.17)$$

$$N_{ij} = \dot{n}_{i,j} - W_{ik}n_{k,j} \quad (2.18)$$

onde  $W_{ij}$  é um tensor anti-simétrico que descreve um fluxo irrotacional (tensor vorticidade), sendo definido por:

$$W_{ij} = \frac{1}{2}\left(\frac{\partial v_i}{\partial x_j} - \frac{\partial v_j}{\partial x_i}\right) \quad (2.19)$$

Como estamos considerando um sistema isolado, a inequação para a energia livre é obtida com base no aumento da entropia  $S$  por unidade de volume, ou seja:



$$\dot{S} \geq 0 \quad (2.20)$$

A energia livre de Helmholtz  $F$  por unidade de volume [42] é definida por:

$$F = U - TS \quad (2.21)$$

Expressando-a em termos da taxa temporal, temos:

$$\dot{F} = \dot{U} - T\dot{S} \quad (2.22)$$

Substituindo (2.20) em (2.22) obtemos:

$$\dot{U} - \dot{F} \geq 0 \quad (2.23)$$

Substituindo (2.13) em (2.23) obtemos:

$$\sigma_{ji}d_{ij} + \pi_{ji}N_{ij} - g_iN_i - \dot{F} \geq 0 \quad (2.24)$$

Esta equação representa um sistema em equilíbrio isotérmico [41].

### 2.1.2 Equações constitutivas

As equações constitutivas relaciona a tensão (tensor stress) a que o fluido está submetido e a deformação causada por esta. Para desenvolver essa teoria, é necessário criar equações constitutivas para as quantidades  $F$ ,  $\sigma_{ji}$ ,  $\pi_{ji}$  e  $N_{ij}$  [42] e que estas são funções de valor único de,

$$n_i, n_{i,j}, \dot{n}_i \text{ e } v_{i,j} \quad (2.25)$$

As quantidades  $\dot{n}_i$  e  $v_{i,j}$  não são invariantes sob transformação de coordenadas e não se transformam como tensores logo, eles devem ser substituídos por  $N_i$  e  $d_{ij}$ . Com isso a energia livre Helmholtz fica da seguinte forma:

$$F = F(n_i, n_{i,j}, N_i, d_{ij}) \quad (2.26)$$

Derivando a (2.26) em relação ao tempo, temos:

$$\dot{F} = \frac{\partial F}{\partial n_i} \dot{n}_i + \frac{\partial F}{\partial n_{i,j}} \dot{n}_{i,j} + \frac{\partial F}{\partial N_i} \dot{N}_i + \frac{\partial F}{\partial d_{ij}} \dot{d}_{ij} \quad (2.27)$$

As equações (2.17) e (2.18) pode ser escrita respectivamente como:

$$\dot{n}_i = N_i + W_{ij} n_j \quad (2.28)$$

$$\dot{n}_{i,j} = N_{ij} - W_{ki} n_{k,j} - (d_{kj} + W_{kj}) n_{i,k} \quad (2.29)$$

Substituindo a (2.28) e (2.29) em (2.27) obtemos:

$$\begin{aligned}
\dot{F} &= \frac{\partial F}{\partial n_i} N_i + \frac{\partial F}{\partial n_i} W_{ij} n_j + \frac{\partial F}{\partial n_{i,j}} N_{ij} + \frac{\partial F}{\partial N_i} \dot{N}_i + \frac{\partial F}{\partial d_{ij}} \dot{d}_{ij} - \underbrace{\frac{\partial F}{\partial n_{i,j}} W_{ki} n_{k,j}}_{j \neq k} \\
&\quad - \underbrace{\frac{\partial F}{\partial n_{i,j}} W_{kj} n_{i,k}}_{k \neq j \neq i} - \underbrace{\frac{\partial F}{\partial n_{i,j}} d_{kj} n_{i,k}}_{i \neq k} \quad \Rightarrow \\
\dot{F} &= \frac{\partial F}{\partial n_i} N_i + \frac{\partial F}{\partial n_i} W_{ij} n_j + \frac{\partial F}{\partial n_{i,j}} N_{ij} + \frac{\partial F}{\partial N_i} \dot{N}_i + \frac{\partial F}{\partial d_{ij}} \dot{d}_{ij} - \frac{\partial F}{\partial n_{i,k}} W_{ji} n_{j,k} \\
&\quad - \frac{\partial F}{\partial n_{k,i}} W_{ji} n_{k,j} - \frac{\partial F}{\partial n_{k,j}} d_{ij} n_{k,i} \quad (2.30)
\end{aligned}$$

Substituindo a (2.30) na (2.24), temos:

$$\begin{aligned}
\sigma_{ji} d_{ij} + \pi_{ji} N_{ij} - g_i N_i - \frac{\partial F}{\partial n_i} N_i - \frac{\partial F}{\partial n_i} W_{ij} n_j - \frac{\partial F}{\partial n_{i,j}} N_{ij} - \frac{\partial F}{\partial N_i} \dot{N}_i - \frac{\partial F}{\partial d_{ij}} \dot{d}_{ij} \\
+ \frac{\partial F}{\partial n_{i,k}} W_{ji} n_{j,k} + \frac{\partial F}{\partial n_{k,i}} W_{ji} n_{k,j} + \frac{\partial F}{\partial n_{k,j}} d_{ij} n_{k,i} \geq 0 \quad (2.31)
\end{aligned}$$

Organizando os termos da equação anterior, ela assume a seguinte forma:

$$\begin{aligned}
\left( \sigma_{ji} + \frac{\partial F}{\partial n_{k,j}} n_{k,i} \right) d_{ij} + \left( \pi_{ji} - \frac{\partial F}{\partial n_{i,j}} \right) N_{ij} - \left( g_i + \frac{\partial F}{\partial n_i} \right) N_i \\
+ \left( \frac{\partial F}{\partial n_i} n_j + \frac{\partial F}{\partial n_{i,k}} n_{j,k} + \frac{\partial F}{\partial n_{k,i}} n_{k,j} \right) W_{ji} - \frac{\partial F}{\partial N_i} \dot{N}_i - \frac{\partial F}{\partial d_{ij}} \dot{d}_{ij} \\
\geq 0 \quad (2.32)
\end{aligned}$$

Em vista das suposições constitutivas, as quantidades  $N_{ij}$ ,  $d_{ij}$ ,  $W_{ji}$  e  $\dot{d}_{ij}$  podem variar arbitrariamente e independente de outras quantidades, logo, seus coeficientes serão nulos [41], isto é:

$$\frac{\partial F}{\partial N_i} = 0, \quad \frac{\partial F}{\partial d_{ij}} + \frac{\partial F}{\partial d_{ji}} = 0 \quad (2.33)$$

Sendo assim, a equação (2.26) reduz-se para:

$$F = F(n_i, n_{i,j}) \quad (2.34)$$

Logo:

$$\left( \frac{\partial F}{\partial n_i} n_j + \frac{\partial F}{\partial n_{i,k}} n_{j,k} + \frac{\partial F}{\partial n_{k,i}} n_{k,j} \right) - \left( \frac{\partial F}{\partial n_j} n_i + \frac{\partial F}{\partial n_{j,k}} n_{i,k} + \frac{\partial F}{\partial n_{k,j}} n_{k,i} \right) = 0 \quad (2.35)$$

$$\pi_{ji} - \frac{\partial F}{\partial n_{i,j}} = 0 \quad (2.36)$$

Sendo assim, a equação (2.32) reduz-se para:

$$\left( \sigma_{ji} + \frac{\partial F}{\partial n_{k,j}} n_{k,i} \right) d_{ij} - \left( g_i + \frac{\partial F}{\partial n_i} \right) N_i \geq 0 \quad (2.37)$$

O tensor stress e a força de contato sobre o diretor é definido respectivamente como:

$$\sigma_{ji} = \sigma_{ji}^0 + \sigma'_{ji} \quad (2.38)$$

$$g_i = g_i^0 + g'_i \quad (2.39)$$

onde  $\sigma_{ji}^0$  e  $g_i^0$  são as componentes estáticas de deformação e  $\sigma'_{ji}$  e  $g'_i$  são as componentes dinâmicas de deformação. Substituindo as equações (2.38) e (2.39) na (2.37), obtemos:

$$\left( \sigma_{ji}^0 + \frac{\partial F}{\partial n_{k,j}} n_{k,i} \right) d_{ij} - \left( g_i^0 + \frac{\partial F}{\partial n_i} \right) N_i + \sigma'_{ji} d_{ij} - g'_i N_i \geq 0 \quad (2.40)$$

As quantidades  $d_{ij}$  e  $N_i$  podem ser escolhidas arbitrariamente e independentemente das partes estáticas, logo:

$$\sigma_{ji}^0 = - \frac{\partial F}{\partial n_{k,j}} n_{k,i} \quad (2.41)$$

$$g_i^0 = - \frac{\partial F}{\partial n_i} \quad (2.42)$$

$$\sigma'_{ji} d_{ij} - g'_i N_i \geq 0 \quad (2.43)$$

Além disso, se somarmos a (2.15) com a (2.35) e fazendo o uso da (2.36), (2.41) e (2.42), temos:

$$\begin{aligned} \sigma_{ij} - \pi_{ki} n_{j,k} + g_i n_j + \underbrace{\frac{\partial F}{\partial n_i} n_j}_{-g_i^0} + \underbrace{\frac{\partial F}{\partial n_{i,k}} n_{j,k}}_{\pi_{ki}} + \underbrace{\frac{\partial F}{\partial n_{k,i}} n_{k,j}}_{-\sigma_{ij}^0} \\ = \sigma_{ji} - \pi_{kj} n_{i,k} + g_j n_i + \underbrace{\frac{\partial F}{\partial n_j} n_i}_{-g_j^0} + \underbrace{\frac{\partial F}{\partial n_{j,k}} n_{i,k}}_{\pi_{kj}} + \underbrace{\frac{\partial F}{\partial n_{k,j}} n_{k,i}}_{-\sigma_{ji}^0} \quad \Rightarrow \end{aligned}$$

Organizando os termos, chega-se:

$$\sigma_{ij} - \sigma_{ij}^0 + (g_i - g_i^0)n_j = \sigma_{ji} - \sigma_{ji}^0 + (g_j - g_j^0)n_i \quad (2.44)$$

Usando a (2.38) e (2.39) na (2.44), temos:

$$\sigma'_{ij} + g'_i n_j = \sigma'_{ji} + g'_j n_i \quad (2.45)$$

A condição de incompressibilidade implica que o stress é indeterminado a uma pressão arbitrária  $p$ . Similarmente há certo grau de indeterminação em  $g_i^0$  e  $\pi_{ji}$ , sendo assim as equações (2.41), (2.42) e (2.43) toma a seguinte forma respectivamente [41]:

$$\sigma_{ji}^0 = -p\delta_{ji} - \frac{\partial F}{\partial n_{k,j}} n_{k,i} \quad (2.46)$$

$$g_i^0 = \gamma n_i - \beta_j n_{i,j} - \frac{\partial F}{\partial n_i} \quad (2.47)$$

$$\pi_{ji} = \beta_j n_i + \frac{\partial F}{\partial n_{i,j}} \quad (2.48)$$

onde  $\gamma$  e  $\beta_i$  são constantes arbitrárias. As equações (2.34) e (2.36) provam que  $\pi_{ji}$  não depende de  $d_{ij}$  ou  $N_i$  tendo que  $\pi_{ji} = \pi_{ji}^0$ .

Para uma deformação estática isotérmica, a equação (2.24) no equilíbrio torna-se:

$$G_i + g_i^0 + \pi_{ji,j} = 0 \quad (2.49)$$

Substituindo a (2.46) e (2.47) na (2.48), temos:

$$\begin{aligned}
 G_i + \gamma n_i - \beta_j n_{i,j} - \frac{\partial F}{\partial n_i} + \left( \beta_j n_i + \frac{\partial F}{\partial n_{i,j}} \right)_{,j} &= 0 \quad \Rightarrow \\
 G_i + \gamma n_i - \beta_j n_{i,j} + \beta_j n_{i,j} - \frac{\partial F}{\partial n_i} + \left( \frac{\partial F}{\partial n_{i,j}} \right)_{,j} &= 0 \quad \Rightarrow \\
 \left( \frac{\partial F}{\partial n_{i,j}} \right)_{,j} - \frac{\partial F}{\partial n_i} + G_i + \gamma n_i &= 0 \quad (2.50)
 \end{aligned}$$

Esta equação é similar a de Euler-Lagrange que minimiza a energia livre associada a diferentes configurações do vetor diretor. A solução desta equação, que será mostrada e discutida no capítulo 5, descreve os defeitos estáticos contidos em uma amostra de cristal líquido nemático.

Para considerar a natureza hidrodinâmica das componentes do tensor stress  $\sigma'_{ji}$  e da força intrínseca de corpo  $g'_i$  é assumido que estas componentes são funções lineares de  $n_i$ ,  $N_i$  e  $d_{ji}$  [41], logo:

$$\sigma'_{ji} = A_{ji}^0 + A_{jik}^1 N_k + A_{jikm}^2 d_{km} \quad (2.51)$$

$$g'_i = B_i^0 + B_{ij}^1 N_j + B_{ijk}^2 d_{jk} \quad (2.52)$$

onde  $A$  e  $B$  são funções de  $n_i$  (com  $T$  e  $\rho$  constante) com os termos de ordem superiores omitidos. Eles podem ser expandidos como:

$$A_{ji}^0 = \alpha_0 \delta_{ji} + \alpha_1 n_i n_j$$

$$A_{jik}^1 = \alpha_2 \delta_{ji} n_k + \alpha_3 \delta_{jk} n_i + \alpha_4 \delta_{ik} n_j + \alpha_5 n_i n_j n_k$$

$$A_{jik}^2 = \alpha_6 \delta_{ji} n_k n_m + \alpha_7 \delta_{ik} n_j n_m + \alpha_8 \delta_{km} n_i n_j + \alpha_9 \delta_{jk} n_i n_m + \alpha_{10} \delta_{jm} n_i n_k \\ + \alpha_{11} \delta_{im} n_j n_k + \alpha_{12} \delta_{ji} \delta_{km} + \alpha_{13} \delta_{jk} \delta_{im} + \alpha_{14} n_i n_j n_k n_m$$

$$B_i^0 = \gamma_0 n_i$$

$$B_{ij}^1 = \gamma_1 \delta_{ij} + \gamma_2 n_i n_j$$

$$B_{ijk}^2 = \gamma_3 \delta_{ij} n_k + \gamma_4 \delta_{ik} n_j + \gamma_5 \delta_{jk} n_i + \gamma_6 n_i n_j n_k$$

É importante notar que, multiplicando a (2.17) por  $n_j$ , temos:

$$n_j N_i = n_j \dot{n}_i - W_{ij} n_j n_i, \quad \text{com } i \neq j \quad (2.53)$$

Para  $j = i$ , temos:

$$n_i N_i = 0 \quad (2.54)$$

onde  $n_i \dot{n}_i = 0$  e  $W_{ii} = \frac{1}{2}(v_{i,i} - v_{i,i}) = 0$ .

E a partir da (2.16) chega-se a:

$$d_{ii} = \frac{1}{2}(v_{i,i} + v_{i,i}) = 0 \quad (2.55)$$

onde  $v_{i,i} = 0$  por ser um fluido incompressível.

Substituindo na (2.51) a expansão do coeficiente  $A$ , obtemos:



$$\begin{aligned}
\sigma'_{ji} = & \alpha_0 \delta_{ji} + \alpha_1 n_i n_j + \alpha_2 \delta_{ji} n_k N_k + \alpha_3 \underbrace{\delta_{jk}}_{k=j} n_i N_k + \alpha_4 n_j N_k \underbrace{\delta_{ik}}_{k=i} + \alpha_5 n_i n_j n_k N_k \\
& + \alpha_6 \delta_{ji} n_k n_m d_{km} + \alpha_7 \underbrace{\delta_{ik}}_{k=i} n_j n_m d_{km} + \alpha_8 \underbrace{\delta_{km}}_{m=k} n_i n_j d_{km} \\
& + \alpha_9 \underbrace{\delta_{jk}}_{j=k} n_i n_m d_{km} + \alpha_{10} \underbrace{\delta_{jm}}_{m=j} n_i n_k d_{km} + \alpha_{11} \underbrace{\delta_{im}}_{m=i} n_j n_k d_{km} \\
& + \alpha_{12} \delta_{ji} \underbrace{\delta_{km}}_{m=k} d_{km} + \alpha_{13} \underbrace{\delta_{jk}}_{k=j} \underbrace{\delta_{im}}_{m=i} d_{km} + \alpha_{14} n_i n_j n_k n_m d_{km} \quad \Rightarrow
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\sigma'_{ji} = & \alpha_0 \delta_{ji} + \alpha_1 n_i n_j + \alpha_2 \delta_{ji} n_k N_k \\
& + \alpha_3 n_i N_j + \alpha_4 n_j N_i + \alpha_5 n_i n_j n_k N_k + \alpha_6 n_k n_m d_{km} \delta_{ji} + \alpha_7 n_j n_k d_{ki} \\
& + \alpha_8 n_i n_j d_{kk} + \alpha_9 n_i n_k d_{kj} + \alpha_{10} n_i n_k d_{kj} + \alpha_{11} n_j n_k d_{ki} + \alpha_{12} \delta_{ji} d_{kk} \\
& + \alpha_{13} d_{ji} + \alpha_{14} n_k n_m d_{km} n_i n_j \quad \Rightarrow
\end{aligned}$$

e fazendo o uso da (2.54) e (2.55) chega-se a:

$$\begin{aligned}
\sigma'_{ji} = & (\alpha_0 + \alpha_6 n_k n_m d_{km}) \delta_{ji} + (\alpha_1 + \alpha_{14} n_k n_m d_{km}) n_i n_j + \alpha_{13} d_{ji} + \alpha_{15} n_i n_k d_{kj} \\
& + \alpha_{16} n_j n_k d_{ki} + \alpha_3 n_i N_j + \alpha_4 n_j N_i \quad (2.56)
\end{aligned}$$

onde,

$$\alpha_{15} = \alpha_9 + \alpha_{10} \quad e \quad \alpha_{16} = \alpha_7 + \alpha_{11}$$

Substituindo agora na (2.52) a expansão do coeficiente  $B$ , obtém:

$$\begin{aligned}
g'_i = & \gamma_0 n_i + \gamma_1 \underbrace{\delta_{ij}}_{j=i} N_j + \gamma_2 n_i n_j N_j + \gamma_3 \underbrace{\delta_{ij}}_{j=i} n_k d_{jk} + \gamma_4 \underbrace{\delta_{ik} n_j}_{j \neq k} d_{jk} + \gamma_5 \underbrace{\delta_{jk}}_{j=k} n_i d_{jk} \\
& + \gamma_6 n_i \underbrace{n_j n_k d_{jk}}_{j \neq k} \quad \Rightarrow
\end{aligned}$$

$$g'_i = \gamma_0 n_i + \gamma_1 N_i + \gamma_2 n_i n_j N_j + \gamma_3 n_k d_{ik} + \gamma_4 \underbrace{\delta_{ij}}_{j=i} n_k d_{jk} + \gamma_5 n_i d_{kk} \\ + \gamma_6 n_i n_j n_k d_{kj} \quad \Rightarrow$$

e fazendo o uso da (2.53) e (2.54) chega-se a:

$$g'_i = (\gamma_0 + \gamma_6 n_j n_k d_{kj}) n_i + \gamma_9 n_k d_{ik} + \gamma_1 N_i \quad (2.57)$$

onde,

$$\gamma_9 = \gamma_3 + \gamma_4 \quad (2.58)$$

Substituindo a (2.56) e (2.57) na (2.45):

$$\alpha_{15} n_j n_k d_{ki} + \alpha_{16} n_i n_k d_{kj} + \alpha_3 n_j N_i + \alpha_4 n_i N_j + \gamma_6 d_{kj} n_k n_i + \gamma_9 d_{ik} n_k n_j + \gamma_1 n_j N_i \\ = \alpha_{15} n_i n_k d_{kj} + \alpha_{16} n_j n_k d_{ki} + \alpha_3 n_i N_j + \alpha_4 n_j N_i + \gamma_6 d_{ki} n_k n_j \\ + \gamma_9 d_{jk} n_k n_i + \gamma_1 n_i N_j \quad \Rightarrow \\ (\alpha_{16} - \alpha_{15}) d_{kj} n_k n_i + (\alpha_4 - \alpha_3) n_i N_j + \gamma_9 d_{ik} n_k n_j + \gamma_1 n_j N_i \\ = (\alpha_{16} - \alpha_{15}) n_j n_k d_{ki} + (\alpha_4 - \alpha_3) n_j N_i + \gamma_9 d_{jk} n_k n_i \\ + \gamma_1 n_i N_j \quad \Rightarrow$$

Como as quantidades  $d_{ki}$ ,  $d_{kj}$  e  $N_i$ ,  $N_j$  podem ser escolhidas arbitrariamente, temos:

$$\gamma_9 = \alpha_{16} - \alpha_{15} \quad (2.59)$$

$$\gamma_1 = \alpha_4 - \alpha_3 \quad (2.60)$$

Alem disso,  $\sigma'_{ji}$  e  $g'_i$  devem satisfazer a inequação da entropia. Substituindo a (2.56) e (2.57) na (2.43), temos:

$$\begin{aligned} & [(\alpha_0 + \alpha_6 n_k n_m d_{km}) \delta_{ji} + (\alpha_1 + \alpha_{14} n_k n_m d_{km}) n_i n_j + \alpha_{13} d_{ji} + \alpha_{15} n_i n_k d_{kj} \\ & + \alpha_{16} n_j n_k d_{ki} + \alpha_3 n_i N_j + \alpha_4 n_j N_i] d_{ij} - [(\gamma_0 + \gamma_6 n_j n_k d_{kj}) n_i \\ & + \gamma_9 n_k d_{ik} + \gamma_1 N_i] N_i \geq 0 \quad \Rightarrow \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} & [(\alpha_0 + \alpha_6 n_k n_m d_{km}) \delta_{ji} d_{ij}] + [\alpha_1 n_i n_j] d_{ij} - (\gamma_0 + \gamma_6 n_j n_k d_{kj}) n_i N_i \\ & + [(\alpha_{14} d_{km} n_k n_m d_{ij} n_i n_j + \alpha_{15} d_{kj} d_{ij} n_i n_k + \alpha_{16} d_{ki} d_{ij} n_j n_k) \\ & + \alpha_{13} d_{ji} d_{ij} + \alpha_3 n_i N_j + \alpha_4 n_j N_i - \gamma_9 d_{ik} n_k N_i - \gamma_1 N_i N_i] \geq 0 \quad \Rightarrow \end{aligned}$$

Isto é,

$$\alpha_1 n_i n_j d_{ij} + (\text{termos quadráticos em } d_{ij}, N_i) \geq 0 \quad (2.61)$$

Como  $d_{ij}$  é arbitrário,  $\alpha_1 = 0$ . Os coeficientes de  $\delta_{ij}$  em  $\sigma'_{ij}$  e  $n_i$  em  $g'_i$  são arbitrários desde que estejam de acordo com as relações (2.54) e (2.55).

Colocando:

$$\mu_1 = \alpha_{14} \quad \mu_4 = \alpha_{13}$$

$$\mu_2 = \alpha_4 \quad \mu_5 = \alpha_{16}$$

$$\mu_3 = \alpha_3 \quad \mu_6 = \alpha_{15}$$

$$\lambda_1 = \gamma_1 \quad \lambda_2 = \gamma_9$$

obtemos,

$$\begin{aligned} \sigma'_{ji} = & \mu_1 n_k n_m d_{km} n_i n_j + \mu_2 n_j N_i + \mu_3 n_i N_j + \mu_4 d_{ji} + \mu_5 n_j n_k d_{ki} \\ & + \mu_6 n_i n_k d_{kj} \end{aligned} \quad (2.62)$$

$$g'_i = -\lambda_1 N_i - \lambda_2 n_j d_{ji} \quad (2.63)$$

onde,

$$\lambda_1 = \mu_3 - \mu_2 \quad e \quad \lambda_2 = \mu_6 - \mu_5 \quad (2.64)$$

foi obtida fazendo o uso da (2.59) e (2.60).

Os  $\mu$ s são conhecidos como os coeficientes de Leslie e representam os seis coeficientes de viscosidade dos cristais líquidos nemáticos [41]. O termo  $\mu_1$  é simétrico e descreve a deformação de um fluxo irrotacional,  $\mu_2$  e  $\mu_3$  é antisimétrico e expressam os torques exercidos sobre as moléculas devido a fluxo rotacional,  $\mu_4$  é correspondente à viscosidade de um fluido isotrópico e por fim,  $\mu_5$  e  $\mu_6$  é antisimétrico e expressam os torques exercidos sobre as moléculas devido a fluxo irrotacional [43].

A equação (2.62) representa o tensor stress que descreve o comportamento dinâmico dos cristais líquidos nemáticos como sendo uma função linear de  $\mathbf{d}$ ,  $\mathbf{w}$  e  $\mathbf{n}$ , onde o termo  $p\delta_{ij}$  é desprezado por não contribuir para a dinâmica. A (2.63) representa o torque exercido pelo diretor sobre o fluido, onde o termo  $\gamma n_i$  é desprezado por não contribuir para a dinâmica e  $(\lambda_1, \lambda_2)$  são respectivamente torques causados por fluxos rotacionais e irrotacionais.

Substituindo a (2.46) e (2.62) na (2.38) obtemos:

$$\begin{aligned} \sigma_{ji} = & -p\delta_{ji} - \frac{\partial F}{\partial n_{k,j}} n_{k,i} + \mu_1 n_k n_m d_{km} n_i n_j + \mu_2 n_j N_i + \mu_3 n_i N_j + \mu_4 d_{ji} + \mu_5 n_j n_k d_{ki} \\ & + \mu_6 n_i n_k d_{kj} \end{aligned} \quad (2.65)$$

ou,

$$\sigma_{ji} = -p\delta_{ji} - \frac{\partial F}{\partial n_{k,j}} n_{k,i} + \sigma'_{ji} \quad (2.66)$$

onde o tensor stress é definido pelas componentes da parte estática e dinâmica. E por fim, substituindo a (2.47) e (2.63) na (2.39) obtemos:

$$g_i = \gamma n_i - \beta_j n_{i,j} - \frac{\partial F}{\partial n_i} - \lambda_1 N_i - \lambda_2 n_j d_{ji} \quad (2.67)$$

ou,

$$g_i = \gamma n_i - \beta_j n_{i,j} - \frac{\partial F}{\partial n_i} + g'_i \quad (2.68)$$

onde o torque exercido pelo diretor sobre o fluido é definido também pelas componentes da parte estática e dinâmica.

Para uma deformação dinâmica isotérmica vamos substituir a (2.48) e a (2.68) na (2.14), chegando a:

$$\left( \frac{\partial F}{\partial n_{i,j}} \right)_{,j} - \frac{\partial F}{\partial n_i} + g'_i + G_i + \gamma n_i = \rho_1 \ddot{n}_i \quad (2.69)$$

onde termo  $\gamma n_i$  como mencionado anteriormente, não tem nenhuma contribuição na dinâmica e o termo  $\rho_1 \ddot{n}_i$  pode ser considerado desprezível para pequenas acelerações angulares do eixo anisotrópico das moléculas [44], logo:

$$\left( \frac{\partial F}{\partial n_{i,j}} \right)_{,j} - \frac{\partial F}{\partial n_i} + g'_i + G_i = 0 \quad (2.70)$$

Esta equação permite que possa determinar os defeitos dinâmicos em uma amostra de cristal líquido nemático. Ela é semelhante a (2.50), mas com o termo dinâmico  $g'_i$  adicionado.

## CAPÍTULO 3

Neste capítulo vai ser dada uma abordagem geral sobre as equações do campo gravitacional que é descrita pela teoria da relatividade geral. O motivo de essa teoria ser abordada neste trabalho, é que essas equações são bastante semelhantes com a equação que descrevem as texturas dos cristais líquidos nemáticos.

### TEORIA DA RELATIVIDADE GERAL [45]

Na relatividade geral, para encontrar as equações que caracteriza um campo gravitacional, devemos determinar a variação da ação  $\delta s$  para o campo gravitacional e para a matéria, ou seja,

$$\delta s_g + \delta s_m = 0 \quad (3.81)$$

A variação da ação para o campo gravitacional é escrita da seguinte forma:

$$\delta s_g = \delta \int R \sqrt{-g} d^N x \quad (3.82)$$

onde  $N = 4$  para o espaço da relatividade geral.

Substituindo a equação (3.80) na (3.82) temos:

$$\begin{aligned} \delta s_g &= \delta \int g^{aj} R_{aj} \sqrt{-g} d^N x \\ &= \int (R_{aj} \sqrt{-g} \delta g^{aj} + R_{aj} g^{aj} \delta \sqrt{-g} + g^{aj} \sqrt{-g} \delta R_{aj}) d^N x \end{aligned} \quad (3.83)$$

O termo  $\delta\sqrt{-g}$  pode ser escrito da seguinte forma:

$$\delta\sqrt{-g} = -\frac{1}{2\sqrt{-g}}\delta g = -\frac{1}{2}\sqrt{-g}g_{aj}\delta g^{aj} \quad (3.84)$$

Substituindo a (3.84) na (3.83) temos:

$$\delta s_g = \int \left( R_{aj} - \frac{1}{2}g_{aj}R \right) \sqrt{-g} \delta g^{aj} d^N x + \int g^{aj} \sqrt{-g} \delta R_{aj} d^N x \quad (3.85)$$

Aplicando o teorema de Gauss, o segundo termo desaparece, pois na fronteira de integração a variação do campo é nula, sendo assim, temos:

$$\delta s_g = \frac{c^3}{16\pi k} \int \left( R_{aj} - \frac{1}{2}g_{aj}R \right) \sqrt{-g} \delta g^{aj} d^N x \quad (3.86)$$

Para variação da ação da matéria em coordenadas curvilíneas, temos:

$$\delta s_m = \frac{1}{c} \delta \int \mathcal{L} \left( g^{aj}, \frac{\partial g^{aj}}{\partial x^l} \right) \sqrt{-g} d^N x \quad (3.87)$$

onde  $\mathcal{L}$  é a lagrangeana do sistema.

Iremos fazer uma transformação de coordenadas de  $x^a$  para  $x'^a = x^a + \xi^a$ , na equação (3.87), onde os  $\xi^a$  são pequenos. As componentes  $g^{aj}$  se transformam de acordo com a equação (3.57),

$$\begin{aligned} g'^{aj}(x'^l) &= \frac{\partial x'^a}{\partial x^l} \frac{\partial x'^j}{\partial x^m} g^{lm}(x^l) = g^{lm} \left( \delta_l^a + \frac{\partial \xi^a}{\partial x^l} \right) \left( \delta_m^j + \frac{\partial \xi^j}{\partial x^m} \right) \\ &\approx g^{aj}(x^l) + g^{am} \frac{\partial \xi^j}{\partial x^m} + g^{lj} \frac{\partial \xi^a}{\partial x^l} \end{aligned} \quad (3.88)$$

Os tensores  $g'^{aj}$  e  $g^{aj}$  são funções das coordenadas  $x'^l$  e  $x^l$  respectivamente. Para que todos os termos estejam em função das mesmas variáveis, a idéia é desenvolver os  $g'^{aj}(x^l + \xi^l)$  em potências de  $\xi^l$ . Considerando os termos de segunda ordem de  $\xi^l$  desprezíveis, pode-se substituir  $g'^{aj}$  por  $g^{aj}$ , ou seja:

$$g'^{aj}(x^l) = g^{aj}(x^l) - \xi^l \frac{\partial g^{aj}}{\partial x^l} + g^{al} \frac{\partial \xi^j}{\partial x^l} + g^{jl} \frac{\partial \xi^a}{\partial x^l} \quad (3.89)$$

Como a ação  $s$  é uma escalar, ela é invariante sob transformação de coordenadas. Pode-se escrever a variação da ação partindo da transformação de coordenadas do  $g^{aj}$  que varia de  $\delta g^{aj}$ . Utilizando o teorema de Gauss e colocando sobre a fronteira  $\delta g^{aj} = 0$ , obtemos  $\delta s_m$  da seguinte forma:

$$\begin{aligned} \delta s_m &= \frac{1}{c} \int \left\{ \frac{\partial \sqrt{-g} \mathcal{L}}{\partial g^{aj}} \delta g^{aj} + \frac{\partial \sqrt{-g} \mathcal{L}}{\partial \frac{\partial g^{aj}}{\partial x^l}} \delta \frac{\partial g^{aj}}{\partial x^l} \right\} d^N x \\ &= \frac{1}{c} \int \left\{ \frac{\partial \sqrt{-g} \mathcal{L}}{\partial g^{aj}} - \frac{\partial}{\partial x^l} \frac{\partial \sqrt{-g} \mathcal{L}}{\partial \frac{\partial g^{aj}}{\partial x^l}} \right\} \delta g^{aj} d^N x \quad (3.90) \end{aligned}$$

Introduzimos aqui a notação,

$$-\frac{1}{2} \sqrt{-g} T_{aj} = \frac{\partial}{\partial x^l} \frac{\partial \sqrt{-g} \mathcal{L}}{\partial \frac{\partial g^{aj}}{\partial x^l}} - \frac{\partial \sqrt{-g} \mathcal{L}}{\partial g^{aj}}$$

Sendo assim, a equação (3.90) pode ser escrita como:

$$\delta s_m = -\frac{1}{2c} \int \sqrt{-g} T_{aj} \delta g^{aj} d^N x \quad (3.91)$$

onde  $T_{aj}$  é o tensor energia-momento da matéria.



O tensor energia-momento, presente na equação de Einstein, produz um campo gravitacional. Na equação dos cristais líquidos o tensor stress, que é equivalente ao tensor energia momento, gera uma curvatura na amostra de cristal líquido [3]. Substituindo as equações (3.86) e (3.91) na (3.81) obtemos:

$$\frac{c^3}{16\pi k} \int \left( R_{aj} - \frac{1}{2} g_{aj} R - \frac{8\pi k}{c^4} T_{aj} \right) \sqrt{-g} \delta g^{aj} d^N x = 0$$

Sabendo que os  $\delta g^{aj}$  são arbitrários, temos:

$$R_{aj} - \frac{1}{2} g_{aj} R = \frac{8\pi k}{c^4} T_{aj} \quad (3.92)$$

Contraindo os índices da equação (3.92), ela pode ser escrita em componentes mista, ou seja:

$$R_a^j - \frac{1}{2} \delta_a^j R = \frac{8\pi k}{c^4} T_a^j \quad (3.93)$$

Essas são as equações do campo de gravitação ou equações de Einstein, que representam uma descrição matemática de uma entidade geométrica, o espaço-tempo, definido por três coordenadas espaciais e uma temporal. Esta entidade quadridimensional é estabelecida pelo conteúdo de energia e matéria existente. Do lado esquerdo das equações temos a descrição geométrica do espaço-tempo e do lado direito, o conteúdo energia e momento. Contraindo os índices  $j$  e  $\alpha$  na equação anterior temos:

$$R = - \frac{16\pi k}{c^4} T \quad (3.94)$$

que é chamado de escalar de curvatura (ver apêndice). Essa curvatura é independente do sistema de coordenadas.

Para uma região onde não há matéria, onde o tensor energia momento nulo, temos as equações de Einstein no vácuo. Sendo assim, a equação (3.94) toma a seguinte forma:

$$R = 0 \quad (3.95)$$

No capítulo 5, será apresentado o valor do escalar de curvatura para os cristais líquidos nemáticos e será feita a mesma analogia com que é feita na relatividade geral, a fim de obter as equações que descrevem fenômenos físicos nas amostras de cristal líquido nemático.

## CAPÍTULO 4

Neste capítulo, é feito inicialmente uma breve abordagem geral sobre o parâmetro de ordem e a sua importância para os cristais líquidos.

Em seguida é apresentado o parâmetro de ordem macroscópico que pode ser associado a certas quantidades físicas determinadas experimentalmente.

Na seção seguinte é feito uma relação entre os parâmetros de ordens macroscópico e microscópico, onde as características macroscópicas tem origem na escala microscópica.

E por fim, será abordado um tipo de parâmetro de ordem com características elipsoidais, no qual, é obtido a partir da interação entre moléculas esféricas.

### PARÂMETRO DE ORDEM

As fases mais comuns dos cristais líquidos termotrópicos estão relacionadas com o grau de alinhamento das moléculas, onde a transição entre as fases de simetria são descritas em termos de um parâmetro de ordem microscópico  $S$ , como descrito no primeiro capítulo. As transições de fases observadas em escala macroscópica são determinadas pelo tensor parâmetro de ordem macroscópico  $Q$ . Em alguns casos o parâmetro de ordem macroscópico é definido de maneira bem simples como, por exemplo, na transição de fase líquido-gás o parâmetro de ordem é a diferença na densidade entre as fases, neste caso  $Q$  é um escalar. Em sistemas ferromagnéticos simples o parâmetro de ordem é a magnetização, onde  $Q$  é uma grandeza vetorial proporcional ao valor médio da magnetização. E para casos mais complexos, a definição do parâmetro de ordem tem como base, a teoria de grupo proposta por Landau para transições de fases de segunda ordem, onde  $Q$  é um tensor [46].

#### 4.1 Parâmetro de Ordem Macroscópico

Para um cristal líquido na fase nemática, o parâmetro de ordem não é determinado diretamente, entretanto, nas referências [47,48] podemos encontrar o parâmetro  $Q$  associado a grandezas como, por exemplo, constante dielétrica, o índice de refração, a susceptibilidade magnética, etc. A fase nemática é menos simétrica (moléculas mais ordenadas) do que na fase líquido isotrópica (moléculas menos ordenadas) e essa diferença de simetria é representada quantitativamente com a introdução do parâmetro de ordem  $Q$ , ou seja:

$$\text{Parâmetro de Ordem Macroscópico} \begin{cases} Q = 0, & \text{Fase isotrópica} \\ Q \neq 0, & \text{Fase nemática} \end{cases}$$

Vamos usar a susceptibilidade magnética para encontrar o parâmetro de ordem macroscópico  $Q$ , tendo em vista que a relação entre a anisotropia da susceptibilidade magnética e  $Q$ , podem ser encontrados de acordo com [49,50]. Levando em consideração as moléculas dos cristais líquidos termotrópicos como rígidas, e estas sendo colocada na presença de um campo magnético, a relação entre o momento magnético  $\mathbf{M}$  e o campo magnético  $\mathbf{H}$  é dada por:

$$M_i = \chi_{ij} H_j \quad (4.1)$$

onde  $\chi_{ji}$  é um elemento do tensor susceptibilidade magnética  $\chi$  e  $i, j = x, y, z$  as coordenadas cartesianas. O tensor  $\chi$  é simétrico e apresenta a seguinte forma na fase isotrópica,

$$\chi_{ij} = \chi \delta_{ij} \quad (4.2)$$

Na fase nemática uniaxial e considerando o eixo  $z$  paralelo ao eixo de simetria,  $\chi$  pode ser escrito em termos de suas diagonais, resultando em:

$$\chi = \begin{pmatrix} \chi_{\perp} & 0 & 0 \\ 0 & \chi_{\perp} & 0 \\ 0 & 0 & \chi_{\parallel} \end{pmatrix} \quad (4.3)$$

onde  $\chi_{\perp}$  e  $\chi_{\parallel}$  correspondem, respectivamente, as susceptibilidade magnética perpendicular e paralela ao eixo de simetria, que por definição, corresponde a uma linha paralela ao vetor diretor.

Na fase isotrópica, a equação (4.2) pode ser escrita como,

$$\chi = \frac{1}{3}(2\chi_{\perp} + \chi_{\parallel}) = \frac{1}{3}\chi_{kk} \quad (4.4)$$

A parte anisotrópica da susceptibilidade magnética é obtida fazendo a comparação das equações (4.2) e (4.3), logo:

$$\Delta\chi_{ij} = \chi_{ij} - \frac{1}{3}\delta_{ij}\chi_{kk} \quad (4.5)$$

Desta forma, um tensor parâmetro de ordem é definido como [51]:

$$Q_{ij} = \frac{\Delta\chi_{ij}}{\Delta\chi_{max}} \quad (4.6)$$

onde o  $\Delta\chi_{max}$  é anisotropia máxima observada para a fase nemática perfeitamente ordenada. Substituindo a equação (4.5) na (4.6) temos:

$$Q_{ij} = \frac{1}{\Delta\chi_{max}} \left( \chi_{ij} - \frac{1}{3} \delta_{ij} \chi_{kk} \right) \quad (4.7)$$

Vamos substituir o termo  $\frac{1}{\Delta\chi_{max}}$ , por um  $Q_0$ , logo:

$$Q_{ij} = Q_0 \left( \chi_{ij} - \frac{1}{3} \delta_{ij} \chi_{kk} \right) \quad (4.8)$$

Onde  $Q_0$  representa uma constante de normalização definida convenientemente para ter um  $Q_{zz} = 1$  em um sistema completamente ordenado, e tomando o eixo  $z$  como referência nesse ordenamento. O tensor  $Q_{ij}$  é um tensor de segunda ordem, simétrico e de traço nulo.

## 4.2 Relação entre o Parâmetro de Ordem Macroscópico e Microscópico

O parâmetro de ordem microscópico é construído usando modelos moleculares simples, como exemplo, modelos que consideram as moléculas como sendo, longas, rígidas e axialmente simétricas, onde a orientação molecular é dada por um vetor unitário  $\mathbf{n}$  ou vetor diretor. Sendo assim, não é possível representar o parâmetro de ordem macroscópico através de quantidades escalares, onde o produto  $\langle \mathbf{n} \cdot \mathbf{n} \rangle$ , torna o parâmetro de ordem macroscópico, um escalar. O parâmetro de ordem macroscópico vetorial envolveria  $\langle \mathbf{n} \rangle$ , que de fato é nulo devido a não ter uma polarização macroscópica, ainda mais, um valor não nulo, poderia violar a equivalência entre as orientações de  $\mathbf{n}$  e  $-\mathbf{n}$ . A definição mais simples é considerar o parâmetro de ordem macroscópico como um tensor de segunda ordem, desta forma tem que [45]

$$Q_{ij} = \langle n_i n_j \rangle - \frac{1}{3} \delta_{ij} \quad (4.9)$$

onde  $n_i$  e  $n_j$  são as componentes do diretor em um referencial fixo. Para um referencial arbitrário, temos

$$Q_{ij} = S \left( n_i n_j - \frac{1}{3} \delta_{ij} \right) \quad (4.10)$$

Onde  $S$  é o parâmetro de ordem escalar. Podemos observar que este tensor apresenta simetria quadrupolar e contém todos os elementos de simetria da fase nemática [46].

### 4.3 Parâmetro de Ordem Elipsoidal [4]

O parâmetro de ordem elipsoidal possui propriedades anisotrópicas e ele foi obtido por Simões, considerando que a interação entre as moléculas nemáticas na transição de fase, seja em função da matriz que caracteriza essas interações. Nessa transição de fase ocorre a mudança da forma esférica da molécula para a forma elipsoidal.

As interações entre essas moléculas com formato elipsoidal, pode ser comparada com as interações entre as moléculas de um cristal líquido. O parâmetro de ordem elipsoidal compõe um dos termos da métrica dos cristais líquidos, que será discutida com maiores detalhes no capítulo 5.

Um elipsoide uniaxial em um sistema de coordenada local, ele assume a forma,

$$\frac{x_1^2}{a^2} + \frac{x_2^2}{b^2} + \frac{x_3^2}{c^2} = 1 \quad (4.11)$$

Onde os comprimentos dos três eixos são respectivamente,  $\{a, b, c\}$ , sendo que cada um desses eixos apontam para direções dadas pelos vetores ortonormais  $\{\mathbf{e}_x, \mathbf{e}_y, \mathbf{e}_z\}$ , onde,

$$\begin{aligned} \mathbf{e}_x &= (1,0,0) \\ \mathbf{e}_y &= (0,1,0) \\ \mathbf{e}_z &= (0,0,1) \end{aligned} \quad (4.12)$$

são os autovetores. Sendo  $x_1, x_2$  e  $x_3$  as coordenadas ao longo deles. Em uma forma mais compacta, este elipsoide pode escrito como,

$$E_{ij}^d x^i x^j = 1 \quad (4.13)$$

Na qual,

$$E_{ij}^d = \begin{pmatrix} \frac{1}{a^2} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{b^2} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{b^2} \end{pmatrix} \quad (4.14)$$

Assume-se que  $b = c$ , ou seja, o eixo definido por  $\mathbf{e}_x$  é o eixo de simetria do elipsoide. Esta matriz diagonalizada caracteriza o elipsoide, o qual é completamente caracterizado pelos autovalores,

$$\left\{ \frac{1}{a^2}, \frac{1}{b^2}, \frac{1}{b^2} \right\} \quad (4.15)$$

O índice  $d$  em  $E_{ij}^d$  é usado para indicar que a matriz esta na forma diagonal. Para generalizar, define-se a matriz  $E_{ij}$  que representa um elipsoide



uniaxial arbitrário, com os mesmos valores dos semi eixos, que podem ser obtidos através da matriz diagonal girando os três principais eixos ortogonais unitários,  $\{\mathbf{e}_x, \mathbf{e}_y, \mathbf{e}_z\}$ , para um novo conjunto de vetores ortogonais unitários,  $\{\mathbf{p}, \mathbf{q}, \mathbf{r}\}$ . Após a rotação,  $E_{ij}$  assume a forma,

$$E_{ij} = \frac{1}{a^2} p_i p_j + \frac{1}{b^2} q_i q_j + \frac{1}{b^2} r_i r_j \quad (4.16)$$

Usando as relações de ortogonalidade entre  $\mathbf{p}, \mathbf{q}$  e  $\mathbf{r}$  pode se determinar os autovetores e autovalores da matriz  $E$ , dados por,

$$E_{ij} p^j = \frac{1}{a^2} p_i, \quad E_{ij} q^j = \frac{1}{a^2} q_i, \quad E_{ij} r^j = \frac{1}{a^2} r_i \quad (4.17)$$

Onde  $\mathbf{p}, \mathbf{q}$  e  $\mathbf{r}$ , são autovetores normalizados e  $\left\{\frac{1}{a^2}, \frac{1}{b^2}, \frac{1}{b^2}\right\}$  são os autovalores de  $E$ . Os Autovetores estão relacionados pela expressão,

$$p_i p_j + q_i q_j + r_i r_j = \delta_{ij} \quad (4.18)$$

A equação (4.18) pode ser escrita da seguinte forma:

$$q_i q_j + r_i r_j = \delta_{ij} - p_i p_j \quad (4.19)$$

Agora substituindo a equação (4.19) na equação (4.16), temos:

$$E_{ij} = \frac{1}{a^2} p_i p_j + \frac{1}{b^2} (\delta_{ij} - p_i p_j) \quad (4.20)$$

Fixando o comprimento do semi eixo uniaxial do elipsoide como  $a = 1$ , para estar de acordo com a normalização de uma esfera com raio  $r = 1$ , logo:

$$E_{ij} = p_i p_j + \frac{1}{b^2} (\delta_{ij} - p_i p_j) \quad (4.21)$$

Organizando os termos da equação (4.21), temos:

$$E_{ij} = \frac{1}{1-e} (\delta_{ij} - ep_i p_j) \quad (4.22)$$

onde,

$$e = 1 - b^2 \quad (4.23)$$

A grandeza  $e$  representa a excentricidade e que tem finalidade de fornecer a magnitude de alongação elipsoidal. E  $\mathbf{p}$  esta representando o eixo de simetria do elipsoide uniaxial. Excentricidades diferentes correspondem a formas moleculares distintas;

- Se  $b > 1$ , temos  $e < 0$  correspondente à fase discótica.
- Se  $b < 1$ , temos  $e > 0$  correspondente à fase calamítica.
- Se  $b = 1$ , temos  $e = 0$ , neste caso com a excentricidade nula, o elipsoide  $E_{ij}$  reduz-se a uma esfera de raio  $r = 1$ .

A anisotropia encontrada nos parâmetros reológicos pode ser interpretada como a deformação induzida no meio nemático pelas superfícies equipotenciais não esféricas. Por isso, esta anisotropia pode ser quantificada medindo a quantidade de elipsoide que esta difere de uma esfera equivalente. Sendo assim, a esfera equivalente pode ser definida como,

$$S_{ij} = \frac{\delta_{ij}}{r^2} \quad (4.23)$$

A matriz elipsoidal é uma função inversa dos seus eixos e será reduzida a uma esfera se estes eixos forem iguais, logo

$$\frac{1}{r^2} = \frac{Tr(E)}{3} \quad (4.24)$$

O termo  $Tr(E)$  (Lê-se traço da matriz  $E$ ) é definido como a soma dos elementos da diagonal principal, sendo assim,

$$Tr(E) = \frac{1}{1-e}(3-e) \quad (4.25)$$

Substituindo a equação (4.25) na equação (4.24), temos:

$$\frac{1}{r^2} = \frac{1}{1-e} \left(1 - \frac{e}{3}\right) \quad (4.26)$$

Substituindo a equação (4.26) na equação (4.23), temos:

$$S_{ij} = \frac{\delta_{ij}}{1-e} \left(1 - \frac{e}{3}\right) \quad (4.27)$$

Essa equação representa uma matriz característica da esfera dada uma matriz elipsoidal  $E_{ij}$ . Como  $E_{ij}$  é uma matriz característica de um elipsoide, a deformação elipsoidal  $\Delta E_{ij}$  pode ser definida pela diferença entre um elipsoide e uma esfera equivalente, ou seja,

$$\Delta E_{ij} = E_{ij} - S_{ij} \quad (4.28)$$

Substituindo as equações (4.22) e (4.27) na equação (4.28), temos:

$$\begin{aligned} \Delta E_{ij} &= \frac{\delta_{ij}}{1-e} - \frac{ep_i p_j}{1-e} - \frac{\delta_{ij}}{1-e} + \frac{e}{3} \left( \frac{\delta_{ij}}{1-e} \right) \\ &= -\frac{ep_i p_j}{1-e} + \frac{e}{3} \left( \frac{\delta_{ij}}{1-e} \right) \\ \Delta E_{ij} &= \frac{e}{1-e} \left( \frac{\delta_{ij}}{3} - p_i p_j \right) \end{aligned} \quad (4.30)$$

Esta equação representa a deformação elipsoidal sendo determinada pelo produto de dois termos distintos,

$$\frac{e}{1-e} \quad (4.31)$$

que é um escalar, e pelo tensor,

$$Q_{ij}^E = \frac{\delta_{ij}}{3} - p_i p_j \quad (4.32)$$

Este tensor é a componente anisotrópica da deformação do elipsoide. Ele coincide com o tensor de momento quadrupolo [52] e apresentando semelhança com expressão do tensor parâmetro de ordem dos cristais líquidos nemáticos. Segundo de Gennes [53], o tensor parâmetro de ordem pode ser medido pela diferença entre as partes anisotrópica e isotrópica de uma dada propriedade física, onde esse procedimento foi realizado na obtenção da equação (4.30).

Fazendo um resumo, a matriz elipsoidal apresentada na equação (4.16) pode ser escrita como:

$$E_{ij} = S_{ij} + \frac{e}{b^2} Q_{ij}^E$$

$$E_{ij} = \frac{1}{1-e} \left\{ \left(1 - \frac{e}{3}\right) \delta_{ij} + e Q_{ij}^E \right\} \quad (4.33)$$

onde o primeiro termo corresponde à parte isotrópica (esférica) e o segundo termo descreve a parte elipsoidal da matriz  $E_{ij}$ , como determinado por Hess.

## CAPÍTULO 5

### ELASTICIDADE E CURVATURA

Neste capítulo, será mostrado que a conexão afim revela que a descrição matemática das texturas dos cristais líquidos nemáticos tem associada uma superfície com uma curvatura intrínseca [4]. Para essa descrição, as derivadas usuais são substituídas por derivadas covariantes que descreve as variações do vetor diretor relacionadas com a elasticidade da amostra de cristal líquido [16,54].

#### 5.1 Curvatura em uma amostra de cristal líquido

De acordo com os trabalhos de Simões e colaboradores [3,4], as interações entre as moléculas dos cristais líquidos, de acordo com Hess [8-11], podem ser obtidas da interação entre moléculas esféricas de um líquido isotrópico, cujo potencial esférico é deformado até obtermos um potencial de forma elipsoidal, sendo que este é uma aproximação para potencial de moléculas nemáticas. Essa hipótese considera que a geometria do potencial influencia o comportamento anisotrópico encontrado na fenomenologia dos cristais líquidos [16]. Em uma linguagem matemática, considera-se que o potencial de interação elipsoidal  $\Phi_E$  entre moléculas nemáticas pode ser transformado em um potencial de interação esférico  $\Phi_S$ , ou seja:

$$\Phi_E(r_S) = \Phi_S(r_E) \quad (5.1)$$

onde  $\mathbf{r}$  é o vetor entre as duas moléculas e os índices  $E$  e  $S$  é uma notação das simetrias elipsoidais e esféricas, respectivamente. O potencial não esférico,  $\Phi_E$ , pode ser substituído pelo potencial esférico,  $\Phi_S$ , se a distância entre dois pontos é dada por uma métrica no qual dois pontos numa superfície

equipotencial não esférica tornam-se equidistante do centro do potencial. Conseqüentemente, existe uma transformação afim entre a física de líquido formado por moléculas esféricas e a física de líquido formado por moléculas elipsoidais. Assim sendo, a medida da distância em uma geometria esférica é dada por [4]:

$$d_S^2 = \delta_{ij} r^i r^j \quad (5.2)$$

e em uma geometria não-esférica,

$$d_E^2 = g_{ij} x^i x^j \quad (5.3)$$

onde  $g_{ij}$  é uma métrica devido a superfícies equipotenciais de potenciais não-esféricos.

A lei de transformação apresentada na equação (5.1) pode ser obtida considerando que os pontos localizados ao longo da superfície equipotencial de simetria elipsoidal permanecem equidistantes do centro do potencial, sendo este, associado a um potencial de simetria esférica satisfazendo a seguinte regra,

$$d_S^2 = d_E^2 \quad (5.4)$$

As medidas das distâncias nos dois potenciais estão relacionadas pela lei da transformação de vetores e derivadas como apresentadas no apêndice A e obedece a seguinte expressão:

$$\frac{ds^i}{dx^k} \frac{dx^k}{ds^j} = \delta_j^i \quad (5.5)$$

Tanto no sistema esférico quanto no sistema elipsoidal, a distância entre os pontos permanecem os mesmos, podemos substituir a equação (5.2) e (5.3) na (5.4), obtemos:

$$g_{kl} = \frac{ds^i}{dx^k} \frac{ds^j}{dx^l} \delta_{ij} \quad (5.6)$$

Onde  $ds^i/dx^k$  representa, em cada ponto de uma amostra de cristal líquido [4], a transformação ponto-dependente que mapeia as coordenadas de uma esfera em uns elipsoidais. Portanto, a passagem a partir do potencial de simetria esférica para um potencial de simetria elipsoidal, ou vice versa, pode ser realizada através de uma mudança da métrica  $g_{ij}$ .

### 5.1.1 Termodinâmica na Métrica

No capítulo 4, foi visto que a matriz elipsoidal  $E_{ij}$  difere de uma matriz esférica por um termo tensorial  $Q_{ij}^E$ , sendo que este é semelhante ao parâmetro de ordem  $Q_{ij}$ , entretanto, esses termos tensoriais apresentam conceitos diferentes. Esses conceitos podem ser aperfeiçoados até que eles tornem-se iguais, obtendo assim uma métrica  $g_{ij}$  dependente da temperatura [4]. Para temperaturas maiores do que o ponto de transição de fase o cristal líquido nemático é isotrópico, ou seja, as propriedades físicas são as mesmas em todas as direções, para temperaturas menores do que o ponto de transição de fase o cristal líquido adquire características anisotrópicas, ou seja, as propriedades físicas variam com a direção.

A anisotropia dos cristais líquidos é observada tanto no nível microscópico quanto no macroscópico. A anisotropia microscópica presente nas moléculas dos materiais líquido-cristalinos apresenta uma anisotropia intrínseca que

quando calculada, pode ser observada na escala macroscópica dependendo da temperatura. Em [4,52], foi usada uma notação para fazer a diferença entre a natureza microscópica e macroscópica de  $Q_{ij}$ , onde  $Q_{ij}(\mathbf{n})$  e  $Q_{ij}(\hat{\mathbf{n}})$  representam respectivamente, o parâmetro de ordem associado à escala macroscópica e microscópica. A conexão entre essas quantidades é realizada quando a variável aleatória microscópica  $\hat{\mathbf{n}}$  oscila tão rapidamente que  $Q_{ij}(\hat{\mathbf{n}})$  é medido no tempo e/ou vizinhança de um ponto, tal quantidade determina o parâmetro de ordem macroscópico  $Q_{ij}(\mathbf{n})$ , onde  $\mathbf{n}$  é o vetor diretor e  $Q_{ij}$  tem a forma da equação (4.32), cuja anisotropia macroscópica uniaxial pode ser medida. Em termos matemáticos temos:

$$\langle Q_{ij}(\hat{\mathbf{n}}) \rangle = S Q_{ij}(\mathbf{n}) \quad (5.7)$$

onde  $\langle x \rangle$  representa uma media estatística de uma variável aleatória  $x$  e  $S$  dá a intensidade com que as oscilações aleatórias fazem a anisotropia microscópica ser observada na escala macroscópica. Multiplicando ambos os lados da equação (5.7) por o parâmetro de ordem macroscópico  $Q^{ji}(\mathbf{n})$  e tomando o traço da expressão resultante temos:

$$Q^{ji}(\mathbf{n}) \langle Q_{ij}(\hat{\mathbf{n}}) \rangle = S Q^{ji}(\mathbf{n}) Q_{ij}(\mathbf{n}) \quad (5.8)$$

Obtendo

$$S = \frac{3}{2} \left( -\frac{1}{3} + \langle (\hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{n})^2 \rangle \right) \quad (5.9)$$

Esta equação é conhecida como parâmetro de ordem escalar dos cristais líquidos como apresentado no capítulo 1.

Vamos considerar agora que o potencial ligado a cada molécula de uma amostra de cristal líquido nemático possui uma superfície equipotencial que



pode ser representada por uma matriz  $E_{ij}$ . Nas vizinhanças de um ponto, podemos entender esse conceito para um grande grupo de moléculas fazendo analogia com a equação (5.79), onde tal conjunto pode ser, ou não, alinhados, gerando, ou não, uma fase nemática. A interpretação dos resultados macroscópicos deste alinhamento microscópico pode ser feita por intermédio da matriz  $Q_{ij}^E$  admitindo que ela satisfaça a mesma relação de ordem microscópica:

$$\langle Q_{ij}^E(\hat{\mathbf{n}}) \rangle = S Q_{ij}(\mathbf{n}) \quad (5.10)$$

Isso significa que ha uma anisotropia microscópica entre as moléculas adjacentes, fazendo com que o eixo de cada uma das moléculas vibrem ao longo da mesma direção, gerando uma fase nemática. Uma conclusão interessante desse raciocínio é que ele fornece resultados macroscópicos para anisotropia elipsoidal microscópicas de cada uma das moléculas. No capítulo 4 foi visto que o termo  $Q_{ij}^E$  aparece na definição da matriz elipsoidal  $E_{ij}$ , observe a equação (4.33), onde esta matriz revela que também tem um complemento macroscópico, a partir do momento que é dado um significado a  $\langle Q_{ij}^E \rangle$  também se deve atribuir um significado a  $\langle E_{ij} \rangle$ . Essa matriz mede a passagem de uma simetria macroscópica isotrópica, determinada pelo termo  $\delta_{ij}$ , para uma simetria macroscópica elipsoidal de uma fase nemática. Será assumido que tal anisotropia é compreendida através da métrica macroscópica  $g_{ij}$ , isto é,

$$\begin{aligned} g_{ij} &= N \langle E_{ij} \rangle \quad \Rightarrow \\ g_{ij} &= N \left\{ \frac{\text{Tr}(E)}{3} \delta_{ij} + \frac{e}{1-e} \langle Q_{ij}(\hat{\mathbf{n}}) \rangle \right\} \quad \Rightarrow \\ g_{ij} &= \frac{N}{1-e} \left\{ \left(1 - \frac{e}{3}\right) \delta_{ij} + e S Q_{ij}(\mathbf{n}) \right\} \quad (5.11) \end{aligned}$$

Onde  $N$  é a uma constante de normalização de modo a assegurar que o vetor diretor seja unitário,

$$n^i n_i = g^{ij} n_i n_j = 1$$

O valor de  $N$  é obtido de maneira simples, mostrando que:

$$g_{ij} = \frac{1}{(3 - e(1 + 2S))} \{(3 - e)\delta_{ij} + 3eS Q_{ij}(\mathbf{n})\} \quad (5.12)$$

e

$$g^{ij} = \frac{1}{(3 - e(S - 1))} \{(3 - e(S + 1))\delta^{ij} + 3eS Q^{ij}(\mathbf{n})\} \quad (5.13)$$

Nessas equações é assumido que a métrica induzida pela anisotropia elipsoidal depende do parâmetro de ordem escalar  $S$  e, sendo assim, determinada pela temperatura nemática. Se  $S = 0$ , temos uma fase isotrópica e a métrica é esférica e macroscópica. Se a temperatura for reduzida, a transição de fase nemático-isotrópica produz um  $S$  não nulo, induzindo uma anisotropia elipsoidal macroscópica descrita pelo parâmetro de ordem escalar  $S$  e pela excentricidade  $e$ . Essa métrica descreve a aproximação da conexão afim de Hess, assim sendo, um efeito termodinâmico induzido pelas anisotropias da fase nemática. Ela apresenta uma assinatura uniforme  $(+, +, +)$  de um espaço tridimensional [3].

### 5.1.2 Conexões e Curvatura

Na referência [4], foi mostrado o que assegura o caráter curvo do espaço é o tensor de Riemann-Christoffel, ou tensor de Ricci na sua forma contraída. Para chegar nesse resultado utiliza-se a aproximação de conexão afim, sendo que esta deve ser seguida pelo uso da diferenciação covariante (ver apêndice A).

Tendo em vista que a hipótese de Hess conduz a uma superfície tridimensional não plana e de curvatura escalar não nula. Essa conexão é dada por:

$$\Gamma_{ij}^k = \frac{1}{2} g^{km} \left( \frac{\partial g_{mi}}{\partial x^j} + \frac{\partial g_{mj}}{\partial x^i} - \frac{\partial g_{ij}}{\partial x^m} \right) \quad (5.14)$$

Fazendo o uso das equações (5.12) e (5.13) chega-se a:

$$\begin{aligned} \Gamma_{ij}^k = \frac{3eS}{2(3 - e(1 + 2S))(3 - e(S - 1))} \{ & (3 - e(1 + 2S))[n^k(\partial_i n_j - \partial_j n_i) \\ & + n_j(\partial_i n^k - \partial^k n_i)] - (3 - e(S - 1))[n_i(\partial_j n^k + \partial^k n_j)] \\ & + 3eS n_i n^m [(n^k \partial_m n_j + n_j \partial_m n^k)] \} \end{aligned} \quad (5.15)$$

Essa expressão representa símbolo de Christoffel em função da variação do vetor diretor e de quantidades conhecidas como parâmetro de ordem e excentricidade da molécula. Com esse resultado, pode-se encontrar o valor do escalar de curvatura (ver apêndice A) sendo escrito como:

$$R = \frac{9e^2 S^2}{2[(3 - e(1 - S))]^2} [\mathbf{n} \cdot \nabla_x \mathbf{n}]^2 - \frac{3eS}{[(3 - e(1 - S))]^2} \nabla \cdot [\mathbf{n} \nabla \cdot \mathbf{n} + \mathbf{n} \times \nabla_x \mathbf{n}] \quad (5.16)$$

Essa equação revela que uma curvatura escalar não nula esta relacionada com as texturas de uma amostra nemática e sendo esta, constituída pela soma dos

termos que serão discutidos na próxima seção como, o *Bend*  $[\mathbf{n} \cdot \nabla x \mathbf{n}]^2$  e o *saddle-splay*  $\nabla \cdot [\mathbf{n} \nabla \cdot \mathbf{n} + \mathbf{n} \times \nabla x \mathbf{n}]$ . O escalar de curvatura possui o mesmo valor em qualquer sistema de coordenadas, ou seja, é invariante sob transformação de coordenadas [4].

## 5.2 Teoria elástica do contínuo

A teoria elástica do contínuo é fundamentada na energia de interação entre as moléculas dos cristais líquidos. Nesta teoria, as interações de escala microscópica são desprezíveis quando comparada com as da escala macroscópica.

Como descrito no capítulo 1, à fase nemática possui certo ordenamento orientacional, entretanto, o alinhamento não é uniforme e cada grupo de moléculas se alinha numa direção preferencial, contribuindo assim, para o aparecimento de singularidades e defeitos (distorções) no alinhamento de uma amostra de cristal líquido. Essas distorções estão relacionadas com as variações locais do vetor diretor.

Em um cristal líquido a densidade de energia livre esta ligada a variação espacial do vetor diretor [41],

$$F = F(n_i, n_{i,j}) \quad (5.17)$$

Expandindo esta energia livre em séries de potências, ou seja,

$$F = k_{ij}n_{i,j} + \frac{1}{2}k_{ijklm}n_{i,j}n_{l,m} \quad (5.18)$$

onde os termos de ordem superior são considerados desprezíveis.

Em notação vetorial a densidade de energia livre para os cristais líquidos é dada por:

$$F = \frac{1}{2}k_{11}(\nabla \cdot \mathbf{n})^2 + \frac{1}{2}k_{22}(\mathbf{n} \cdot \nabla \times \mathbf{n})^2 + \frac{1}{2}k_{33}(\mathbf{n} \times \nabla \times \mathbf{n})^2 - (k_{22} + k_{24})\nabla \cdot (\mathbf{n} \nabla \cdot \mathbf{n} + \mathbf{n} \times \nabla \times \mathbf{n}) \quad (5.19)$$

Esta equação representa a energia livre de Frank, proposta por ele, em 1958. Os termos  $k_{11}$ ,  $k_{22}$ ,  $k_{33}$  e  $(k_{22} + k_{24})$  são conhecidos como constantes elásticas, análoga a de um sistema massa-mola, e medem a dificuldade de torcer o vetor diretor de um cristal líquido. A constante  $k_{11}$  é chamada de *splay*, que calcula a dificuldade de divergir o vetor diretor,  $k_{22}$  é chamada de *twist*, que calcula a dificuldade de torcer o vetor diretor,  $k_{33}$  é chamada de *bend*, que calcula a dificuldade de flexionar o vetor diretor e as constantes  $(k_{22} + k_{24})$  são chamadas de *saddle-splay*, sendo que estas representam defeitos presentes numa amostra de cristal líquido devido a superfícies de contato onde esta se encontra confinada.

Nesta dissertação vamos considerar a energia livre de Frank desprezando os efeitos devido às superfícies de contato logo:

$$F = \frac{1}{2}k_{11}(\nabla \cdot \mathbf{n})^2 + \frac{1}{2}k_{22}(\mathbf{n} \cdot \nabla \times \mathbf{n})^2 + \frac{1}{2}k_{33}(\mathbf{n} \times \nabla \times \mathbf{n})^2 \quad (5.20)$$

As constantes  $k_{11}$ ,  $k_{22}$  e  $k_{33}$  depende da temperatura, tem dimensão de energia por unidade de comprimento e a suas ordens de grandezas é de  $10^{-12}$  N (Newton) tanto para os cristais líquidos termotrópicos quanto para os Liotrópicos [44]. A figura 5-1 mostra as distorções associada as três constantes.

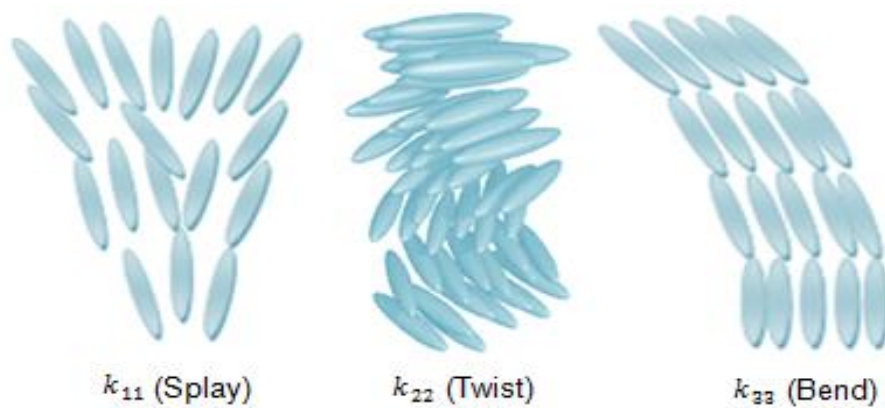


Figura 5-1: Distorções em um cristal líquido nemático [44].

Na próxima seção vamos apresentar uma breve descrição sobre os defeitos numa amostra de cristal líquido.

### 5.3 Defeitos topológicos em um cristal líquido

Quando há um resfriamento na matéria ela pode mudar para uma fase com propriedades físicas e, muitas vezes, simétricas, da fase original. O defeitos topológicos presentes em amostra de cristal líquido nemático podem ser observados por meio de uma transição da fase isotrópica para a fase nemática [44].

Há trabalhos na literatura que mapeiam esses defeitos por meio de técnicas experimentais de Microscopia Óptica de Luz polarizada. A figura 5-2 mostra esses defeitos utilizando essa técnica, na qual a textura apresentada é a de *Schlieren* observadas na fase nemática [55].

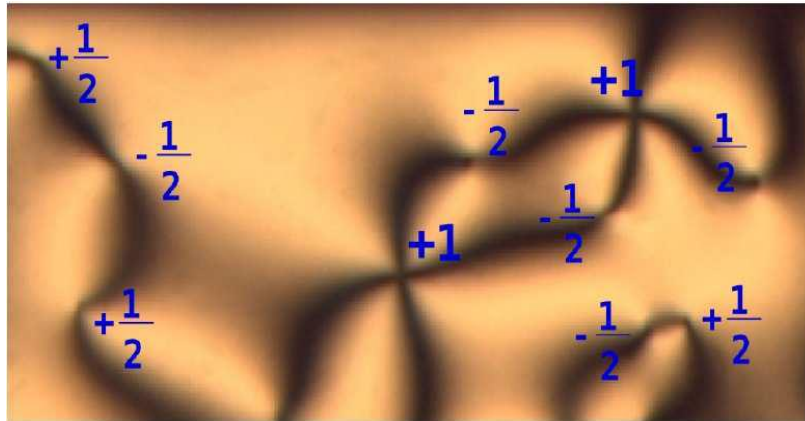


Figura 5-2: Foto da textura Schlieren em um cristal líquido nemático Utilizando a técnica de microscopia óptica de luz polarizada [55].

Alem da variação do vetor diretor numa amostra de cristal líquido, nesta figura é possível observar dois tipos de defeitos, os do tipo linha ou corda e os do tipo ponto, que possuem intensidade que vale respectivamente  $\pm\frac{1}{2}$  e  $\pm 1$ , onde o parâmetro de ordem orientacional modifica-se descontinuamente.

Os defeitos do tipo ponto estão diretamente ligados às condições de contorno impostas pelas superfícies de contato.

Defeitos do tipo linha, que também são chamados de declinações, são mais que estão presente em cristais líquidos é um grande problema para indústria de mostradores digitais, por espalharem a luz.

Na próxima seção, vamos dedicar a nossa atenção para o defeito do tipo linha e descrever as configurações do vetor diretor em torno deste.

### 5.3.1 Configurações bidimensional e tridimensional do vetor diretor via energia livre de Frank

Para descrever estas configurações, vamos fazer uma aproximação para as constantes elásticas, tendo em vista que elas possuem a mesma ordem de grandeza, sendo assim temos,  $k_{11} = k_{22} = k_{33} = k$ . A equação (5.20) toma a seguinte forma:

$$F = \frac{k}{2} [(\nabla \cdot \mathbf{n})^2 + (\mathbf{n} \cdot \nabla_x \mathbf{n})^2 + (\mathbf{n} \times \nabla_x \mathbf{n})^2] \quad (5.21)$$

Para o caso bidimensional, vamos considerar uma estrutura planar com o vetor diretor no plano  $xy$  e que a declinação corta este plano na origem, como mostra a figura 5-3.

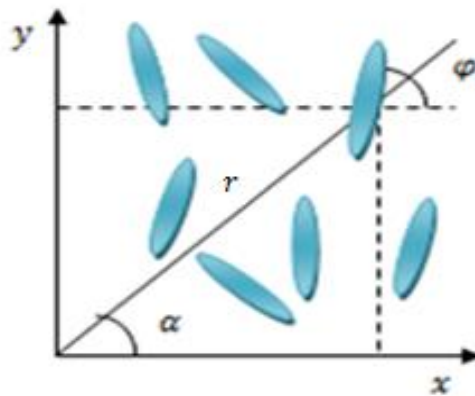


Figura 5-3: Orientação do vetor diretor ao longo de uma linha que faz um ângulo polar  $\alpha$  [41].

O diretor apresenta uma orientação específica, dada pelo ângulo  $\varphi$ , em cada ponto deste plano, onde  $\varphi$  é uma função de  $x$  e  $y$ , isto é,  $\varphi(x, y)$ . Sendo assim as componentes do vetor diretor da figura 5-3 é dada por:

$$\begin{cases} n_x = \cos \varphi(x, y) \\ n_y = \sin \varphi(x, y) \\ n_z = 0 \end{cases}$$

Calculando o divergente, o produto interno com o rotacional, e o produto vetorial com o rotacional do diretor, obtemos respectivamente,



$$\nabla \cdot \mathbf{n} = -\sin \varphi \frac{\partial \varphi}{\partial x} + \cos \varphi \frac{\partial \varphi}{\partial y} \quad (5.22)$$

$$\mathbf{n} \cdot \nabla \times \mathbf{n} = 0 \quad (5.23)$$

$$\mathbf{n} \times \nabla \times \mathbf{n} = \left( \sin \varphi \cos \varphi \frac{\partial \varphi}{\partial x} + \sin^2 \varphi \frac{\partial \varphi}{\partial y} \right) \mathbf{i} - \left( \sin \varphi \cos \varphi \frac{\partial \varphi}{\partial y} + \cos^2 \varphi \frac{\partial \varphi}{\partial x} \right) \mathbf{j} \quad (5.24)$$

Usando esses resultados na equação (5.21) obtemos:

$$F = \frac{k}{2} \left[ \left( \frac{\partial \varphi}{\partial x} \right)^2 + \left( \frac{\partial \varphi}{\partial y} \right)^2 \right] = \frac{k}{2} (\nabla \varphi)^2 \quad (5.25)$$

Esta equação é uma forma reduzida da energia livre de Frank devida aos defeitos, neste caso as declinações, presentes em uma amostra de cristal líquido nemático.

A configuração do diretor em torno da declinação pode possuir tal forma que minimize a energia livre. Para este fim, será reescrito a equação (2.50) considerando a ausência de forças de corpo externas,  $G_i = 0$ , e  $\gamma = 0$ , ou seja:

$$\left( \frac{\partial F}{\partial n_{i,j}} \right)_{,j} - \frac{\partial F}{\partial n_i} = 0 \quad (5.26)$$

Substituindo a equação (5.25) na (5.26), chega-se,

$$\nabla^2 \varphi = 0 \quad (5.27)$$

Esse resultado corresponde à equação de Laplace bidimensional.

Para encontrarmos a solução da equação (5.27), vamos escrevê-la em coordenadas polares  $(r, \varphi)$  e explorar a simetria da amostra de cristal líquido por estarem contida no plano, ou seja,

$$\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( r \frac{\partial \varphi}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 \varphi}{\partial \alpha^2} = 0 \quad (5.28)$$

Aplicando o método de separação de variáveis e observando que a orientação do vetor diretor depende somente de  $\varphi(\alpha)$ , chegamos a,

$$\frac{d^2 \varphi}{d\alpha^2} = 0 \quad (5.29)$$

Resolvendo esta equação, encontra-se uma solução linear [41],

$$\varphi(\alpha) = s\alpha + c \quad (5.30)$$

onde  $\alpha = \tan^{-1} y/x$  e  $c$  é uma constante.

A equação (5.30) descreve a configuração do vetor diretor em torno da declinação, sendo que esses defeitos estão relacionados com o fator  $s$  (força da declinação) e um parâmetro constante  $c$ . O ângulo  $\varphi$  está relacionado com o termo *Twist*, sendo que este descreve uma torção em uma amostra de cristal líquido. Na figura 5-4, é apresentada as possíveis configurações locais do diretor para diferentes valores de  $s$  e  $c$ .

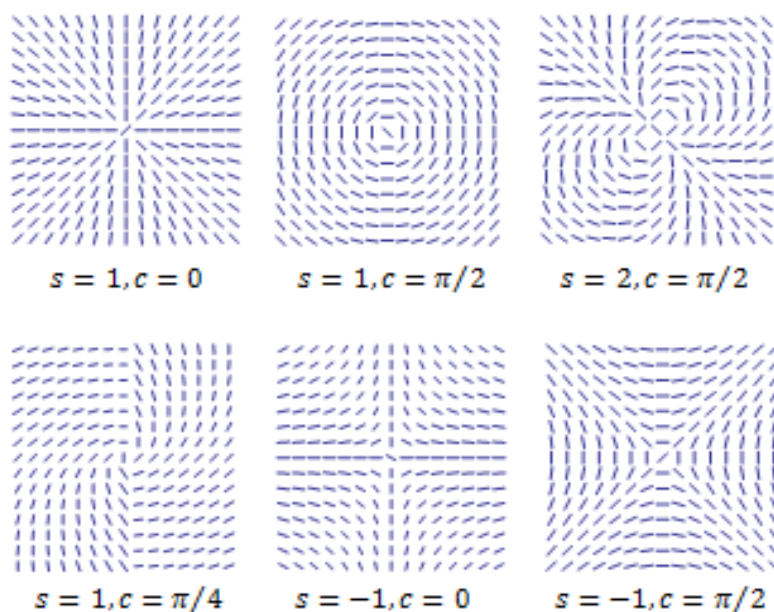


Figura 5-4: Possíveis configurações do vetor diretor.

Por volta de 1970, Cladis, Kleman e Mayer mostraram que os defeitos com  $s = \pm 1$  formam estruturas finas capilares onde o vetor diretor tem a tendência de abandonar a configuração de uma estrutura planar escapando para a terceira dimensão [41], ver figura 5-5.

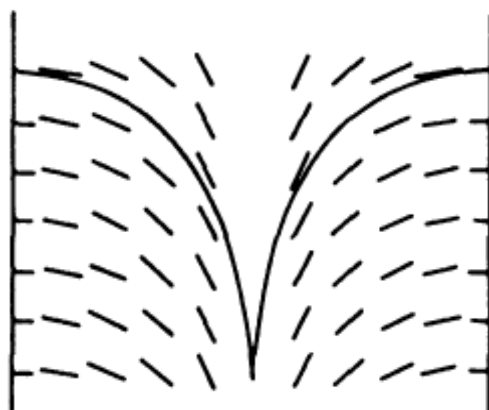


Figura 5-5: Diretor no centro de uma declinação com  $s = +1$  [41].

Vamos considerar o nemático em um capilar de raio  $r_0$  com o diretor apresentando uma inclinação na direção do eixo capilar (eixo  $z$ ) na região de

$0 < r < r_0$  e com as componentes deste, sendo escrita de acordo com a figura 5-6, ou seja:

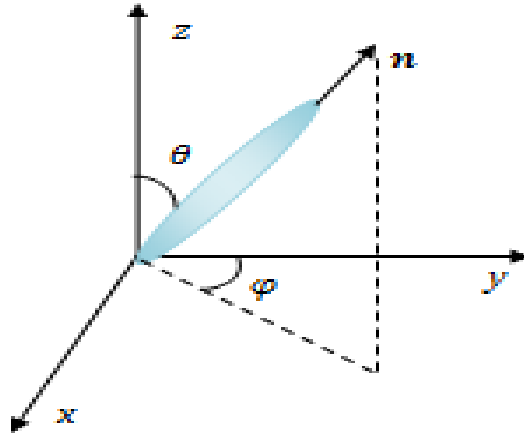


Figura 5-6: Representação espacial do vetor diretor em termos de  $\theta$  e  $\varphi$  [44].

$$\begin{cases} n_x = \sin\varphi \sin\theta \\ n_y = \cos\varphi \sin\theta \\ n_z = \cos\theta \end{cases}$$

onde  $\varphi$  é ângulo que o diretor estabelece no plano  $xy$  e  $\theta$  é o ângulo que o diretor forma com o eixo  $z$ . Substituindo essas relações na equação (5.21), obtemos a densidade de energia desta configuração, logo:

$$F = \frac{1}{2}k[(\nabla\theta)^2 + \sin^2\theta(\nabla\varphi)^2 + 2\sin\theta\cos\theta\{\nabla\varphi \cdot \nabla\theta\}] \quad (5.31)$$

Vamos agora encontrar os valores de  $\varphi$  e  $\theta$  que minimize a energia descrita pela equação anterior. Para este fim, o primeiro passo é substituir a equação (5.31) na (5.26) obtendo:

$$\nabla^2\theta - \sin\theta\cos\theta(\nabla\varphi)^2 = 0 \quad (5.32)$$

$$\nabla^2\theta + 2\cos\theta(\nabla\theta \cdot \nabla\varphi) = 0 \quad (5.33)$$

A solução dessas equações diferenciais acopladas descreve a configuração do vetor diretor dentro do capilar. Explorando a simetria do problema, temos que  $\varphi = \varphi(\alpha)$  e  $\theta = \theta(r)$ , ou seja, as soluções  $\varphi$  e  $\theta$  dependem de coordenadas polares  $\alpha$  e  $r$  respectivamente. Sendo assim, as equações (5.32) e (5.33) pode ser escrita da seguinte maneira:

$$\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( r \frac{\partial \theta}{\partial r} \right) - \sin\theta\cos\theta(\nabla\varphi)^2 = 0 \quad (5.34)$$

$$\frac{\partial^2 \varphi}{\partial \alpha^2} = 0 \quad (5.35)$$

A solução da equação (5.35) já foi demonstrada, observe as equações (5.29) e (5.30), ou seja:

$$\varphi(\alpha) = s\alpha + c \quad (5.36)$$

Onde é  $s = \pm 1$ . Substituindo a equação (5.36) na (5.34), chega-se a seguinte equação diferencial,

$$\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( r \frac{\partial \theta}{\partial r} \right) - \frac{s^2}{r^2} \sin\theta\cos\theta = 0 \quad (5.37)$$

Para encontrar a solução desta equação, considere as seguintes condições de contorno [41]:

$$\begin{aligned} \theta &= 0 & \text{para } r &= 0 \\ \theta &= \frac{\pi}{2} & \text{para } r &= r_0 \end{aligned}$$

Assim sendo, a equação diferencial (5.37) possui a seguinte solução:

$$\theta = 2 \tan^{-1} \left( \frac{r}{r_0} \right)^{|s|} \quad (5.38)$$

Este resultado descreve uma configuração de escape (vetor diretor escapando para uma terceira dimensão) para um ângulo de inclinação  $\theta$  em relação ao eixo  $z$ . Esta configuração está relacionada com os termos *Bend* e *Splay* (ver figura 5-7).

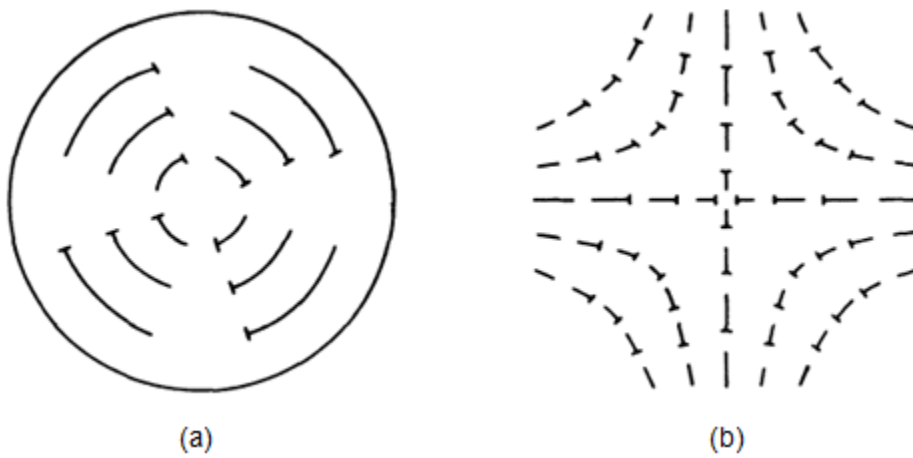


Figura 5-7: Configurações de Escape: (a)  $s = +1$  e  $c = \frac{\pi}{2}$  e (b)  $s = -1$  [41].

## CAPÍTULO 6

Neste capítulo iremos resolver a equação de Einstein dos cristais líquidos, proposta no trabalho de 2010 [3], para os casos particulares do vetor diretor bidimensional e tridimensional. As soluções desta equação descrevem as configurações do vetor diretor em torno dos defeitos. E por fim, será proposto um escalar de curvatura quadridimensional e, a partir deste, será obtido às configurações dinâmicas do vetor em torno defeitos.

### A EQUAÇÃO DE EINSTEIN DOS CRISTAIS LÍQUIDOS NEMÁTICOS

#### 6.1 Configurações bidimensional e tridimensional do vetor diretor via Relatividade geral

Na seção 5.2, mostramos que a não orientação do vetor diretor garante que a superfície tridimensional determinada pela textura de uma amostra de cristal líquido nemático, apresenta uma curvatura intrínseca, cuja curvatura é dada pela equação (5.16). Esses defeitos podem ser descritos por uma equação semelhante à de Einstein para o campo gravitacional, referente apenas à parte espacial, ou seja, ela é tridimensional. Essa equação foi proposta por [3] da seguinte forma:

$$R_{ij} - \frac{1}{2}g_{ij}R = G\sigma_{ij} \quad (6.1)$$

onde  $R_{ij}$  é o tensor de curvatura de Ricci e,

$$\sigma_{ij} = \frac{\partial n_k}{\partial x^i} \frac{\partial F}{\partial \left( \frac{\partial n_k}{\partial n_j} \right)} - \delta_{ij} F \quad (6.2)$$

é o tensor elástico de stress que é similar ao tensor energia-momento da relatividade geral, e  $G$  é o multiplicador de lagrange. Contraindo os índices da equação (6.1) chegamos a:

$$R = -2G\sigma \quad (6.3)$$

Na relatividade geral, as equações de Einstein no vácuo são obtidas para uma região onde não há massa como foi apresentada no capítulo 3. Fazendo a mesma analogia na equação de Einstein dos cristais líquidos nemáticos em que o tensor elástico stress é nulo, ou seja,  $\sigma_{ij} = 0$ , sendo assim, devemos ter um escalar de curvatura nulo  $R = 0$  [3]. Partindo desse pressuposto, a equação (5.16) toma a seguinte forma:

$$0 = \frac{9e^2 S^2}{2[(3 - e(1 - S))]^2} [\mathbf{n} \cdot \nabla x \mathbf{n}]^2 - \frac{3eS}{[(3 - e(1 - S))]} \nabla \cdot [\mathbf{n} \nabla \cdot \mathbf{n} + \mathbf{n} x \nabla x \mathbf{n}] \quad (6.4)$$

Considerando o caso bidimensional, o primeiro termo da equação (6.4) é nulo (ver equação 5.23) e, portanto:

$$\nabla \cdot [\mathbf{n} \nabla \cdot \mathbf{n} + \mathbf{n} x \nabla x \mathbf{n}] = 0 \quad (6.5)$$

Esta equação pode ser escrita como:



$$\nabla \cdot [\mathbf{n} \cdot \nabla x \mathbf{n} + \mathbf{n} x \nabla x \mathbf{n}] = (\nabla \cdot \mathbf{n})^2 + (\nabla x \mathbf{n})^2 + \mathbf{n} \cdot (\nabla^2 \mathbf{n}) = 0 \quad (6.6)$$

Multiplicando a equação anterior pelo vetor diretor  $\mathbf{n}$  e levando em conta de que  $\mathbf{n} \cdot \mathbf{n} = 1$ , temos:

$$\mathbf{n} \cdot (\nabla \cdot \mathbf{n})^2 + \mathbf{n} \cdot (\nabla x \mathbf{n})^2 + (\nabla^2 \mathbf{n}) = 0 \quad \Rightarrow$$

$$\nabla^2 \mathbf{n} = -\mathbf{n}[(\nabla \cdot \mathbf{n})^2 + (\nabla x \mathbf{n})^2] \quad (6.7)$$

Temos que,

$$\mathbf{n} = n_x \mathbf{i} + n_y \mathbf{j} \quad (6.8)$$

e

$$\nabla^2 \mathbf{n} = \nabla^2 n_x \mathbf{i} + \nabla^2 n_y \mathbf{j} \quad (6.9)$$

Substituindo as equações (6.8) e (6.9) na equação (6.7) obtemos:

$$\nabla^2 n_x \mathbf{i} + \nabla^2 n_y \mathbf{j} = -(n_x \mathbf{i} + n_y \mathbf{j})[(\nabla \cdot \mathbf{n})^2 + (\nabla x \mathbf{n})^2] \quad (6.10)$$

Esta equação pode reescrita como:

$$\nabla^2 n_x = -n_x [(\nabla \cdot \mathbf{n})^2 + (\nabla x \mathbf{n})^2] \quad (6.11)$$

e

$$\nabla^2 n_y = -n_y [(\nabla \cdot \mathbf{n})^2 + (\nabla_x \mathbf{n})^2] \quad (6.12)$$

onde o laplaciano das componentes do vetor diretor é escrito como:

$$\nabla^2 n_x = \partial_x \partial_x n_x + \partial_y \partial_y n_x \quad (6.13)$$

e

$$\nabla^2 n_y = \partial_x \partial_x n_y + \partial_y \partial_y n_y \quad (6.14)$$

Substituindo as equações (6.13) e (6.14) na (6.11) e (6.12) respectivamente, obtemos:

$$\partial_x \partial_x n_x + \partial_y \partial_y n_x = -n_x [(\nabla \cdot \mathbf{n})^2 + (\nabla_x \mathbf{n})^2] \quad (6.15)$$

e

$$\partial_x \partial_x n_y + \partial_y \partial_y n_y = -n_y [(\nabla \cdot \mathbf{n})^2 + (\nabla_x \mathbf{n})^2] \quad (6.16)$$

Dividindo a equação (6.15) pela (6.16), e substituindo as componentes do vetor diretor para o caso bidimensional chega-se a:

$$\nabla^2 \varphi = 0 \quad (6.17)$$

Essa expressão representa a equação de laplace para os cristais líquidos nemáticos, onde ela pode ser obtida na relatividade geral para um limite não relativístico da equação de Einstein. Através dela, torna-se possível a descrição das configurações do vetor diretor ao redor dos defeitos topológicos.

Considerando agora o caso tridimensional onde as componentes do vetor diretor, como mostrado no capítulo anterior, são escritas como:

$$\begin{cases} n_x = \sin\varphi \sin\theta \\ n_y = \cos\varphi \sin\theta \\ n_z = \cos\theta \end{cases}$$

Substituindo essas componentes na equação (6.4) e levando em conta novamente de que  $\mathbf{n} \cdot \mathbf{n} = 1$ , temos:

$$\nabla^2 \mathbf{n} = -\mathbf{n} \left[ (\nabla \cdot \mathbf{n})^2 + \left( \frac{6 - e(S + 2)}{6 - 2e(1 - S)} \right) (\nabla x \mathbf{n})^2 \right] \quad (6.18)$$

onde as componentes do laplaciano que atuam nas componentes do vetor diretor são escritas como:

$$\begin{aligned} \partial_x \partial_x n_x + \partial_y \partial_y n_x + \partial_z \partial_z n_x \\ = -n_x \left[ (\nabla \cdot \mathbf{n})^2 + \left( \frac{6 - e(S + 2)}{6 - 2e(1 - S)} \right) (\nabla x \mathbf{n})^2 \right] \end{aligned} \quad (6.19)$$

$$\begin{aligned} \partial_x \partial_x n_y + \partial_y \partial_y n_y + \partial_z \partial_z n_y \\ = -n_y \left[ (\nabla \cdot \mathbf{n})^2 + \left( \frac{6 - e(S + 2)}{6 - 2e(1 - S)} \right) (\nabla x \mathbf{n})^2 \right] \end{aligned} \quad (6.20)$$

$$\begin{aligned} \partial_x \partial_x n_z + \partial_y \partial_y n_z + \partial_z \partial_z n_z \\ = -n_z \left[ (\nabla \cdot \mathbf{n})^2 + \left( \frac{6 - e(S + 2)}{6 - 2e(1 - S)} \right) (\nabla x \mathbf{n})^2 \right] \end{aligned} \quad (6.21)$$

Substituindo o valor das componentes  $n_x$ ,  $n_y$  e  $n_z$ , obtemos:

$$\nabla^2\theta - \sin\theta\cos\theta(\nabla\varphi)^2 = 0 \quad (6.22)$$

$$\nabla^2\theta + 2\cos\theta(\nabla\theta \cdot \nabla\varphi) = 0 \quad (6.23)$$

Estas equações são iguais as (5.32) (5.33), onde a solução delas é dada pelas equações (5.36) e (5.38). Com este resultado fica evidente a relação entre a física dos cristais líquidos e a teoria da relatividade. Sendo assim, as amostras de cristais líquidos pode fornecer um laboratório importante para estudar defeitos cosmológicos e sua interação. Os defeitos produzidos na transição isotrópico-nemática são equivalente topológica para aqueles encontrados no início do universo, após uma quebra de simetria, na qual os parâmetros de ordem devem ser o mesmo. [3].

Na próxima seção vamos chegar a uma equação que descreve a configuração dinâmica do vetor diretor ao redor dos defeitos presentes em uma amostra de cristal líquido.

## 6.2 Configurações dinâmicas do vetor diretor

Pela teoria contínua, foram obtidas equações estáticas tanto bidimensionais quanto tridimensional, tendo em vista que essas mesmas equações também foram obtidas usando a teoria da física dos cristais líquidos. Nesta seção vamos obter equações que descreva a dinâmica dos defeitos presentes em uma amostra de cristal líquido nemático.

As equações que descrevem configurações dinâmicas do vetor diretor em torno de defeitos presente em uma amostra de cristal líquido nemático são obtidas minimizando a seguinte expressão,

$$\left( \frac{\partial F}{\partial n_{i,j}} \right)_{,j} - \frac{\partial F}{\partial n_i} + g'_i + G_i = 0 \quad (6.24)$$

Neste trabalho iremos considerar as forças externas como nulas, ou seja,  $G_i = 0$ . Sendo assim temos:

$$\left( \frac{\partial F}{\partial n_{i,j}} \right)_{,j} - \frac{\partial F}{\partial n_i} + g'_i = 0 \quad (6.25)$$

As componentes bidimensionais do vetor diretor dependentes do tempo são escritas como:

$$\begin{cases} n_x = \cos \varphi(x, y, t) \\ n_y = \sin \varphi(x, y, t) \\ n_z = 0 \end{cases}$$

Neste caso, consideramos que o vetor diretor se encontra em um plano e que, em cada ponto deste plano ele possui uma orientação dinâmica em torno da declinação, dada por  $\varphi = \varphi(x, y, t)$ . O diretor pode girar em torno do eixo  $z$ , não havendo o movimento translacional, ou seja,  $v_{i,i} = 0$ . Sendo assim, a taxa do tensor deformação  $d_{ij}$  e o tensor vorticidade  $W_{ij}$  ambos são iguais à zero. O termo que descreve a dinâmica já foi deduzido na seção 2.1.2 do capítulo 2, ele é escrito como:

$$g'_i = -\lambda_1 N_i - \lambda_2 n_j d_{ji} \quad (6.26)$$

Como a taxa do tensor deformação  $d_{ij} = 0$  temos,

$$g'_i = -\lambda_1 N_i \quad (6.27)$$

O termo  $N_i$  descreve a velocidade angular do vetor diretor em relação ao fluido, e é escrito como,

$$N_i = \dot{n}_i - W_{ij}n_j \quad (6.28)$$

o tensor vorticidade  $W_{ij} = 0$ , logo:

$$N_i = \dot{n}_i \quad (6.29)$$

Inserindo esta equação na (6.27) chega-se a,

$$g'_i = -\lambda_1 \dot{n}_i = -\lambda_1 \frac{\partial n_i}{\partial t} \quad (6.30)$$

Substituindo este resultado na (6.25) obtemos:

$$\left( \frac{\partial F}{\partial n_{i,j}} \right)_{,j} - \frac{\partial F}{\partial n_i} - \lambda_1 \frac{\partial n_i}{\partial t} = 0 \quad (6.31)$$

Usando as componentes bidimensionais do diretor na equação (5.21), temos que a densidade energia é dada por:

$$F = \frac{k}{2} (\nabla \varphi)^2 \quad (6.32)$$

Substituindo essa equação na (6.31), temos [32]:

$$\nabla^2 \varphi = \frac{\lambda_1}{k} \frac{\partial \varphi}{\partial t} \quad (6.33)$$

Usando o método de separação de variáveis nessa equação obtemos:

$$\varphi(\alpha, t) = \varphi_0 e^{(s^2 k / \lambda_1 r^2) t} \quad (6.34)$$

Onde  $s$  é a força da declinação,  $k$  é constante elástica,  $\lambda_1$  é o torque causado por fluxos rotacionais e  $r$  é o tamanho da declinação.

A equação (6.34) descreve uma configuração do vetor diretor em torno da declinação, sendo que esta configuração é dependente do tempo e na ausência de campos externos [44].

Para o caso tridimensional (ver figura 5.6), as componentes são escritas como:

$$\begin{cases} n_x = \sin\varphi \sin\theta \\ n_y = \cos\varphi \sin\theta \\ n_z = \cos\theta \end{cases}$$

onde as orientações dinâmicas são dadas por  $\varphi = \varphi(x, y, z, t)$  e  $\theta = \theta(x, y, z, t)$ . Substituindo essas componentes na equação (5.21) e o resultado dessa operação na (6.31) obtemos:

$$\nabla^2\theta - \sin\theta\cos\theta(\nabla\varphi)^2 = \frac{\lambda_1}{k}\dot{\theta} \quad (6.35)$$

$$\nabla^2\theta + 2\cos\theta(\nabla\theta \cdot \nabla\varphi) = \frac{\lambda_1}{k}\sin\theta\dot{\varphi} \quad (6.36)$$

As soluções dessas duas equações descrevem as configurações dinâmicas do vetor diretor ao nas proximidades dos defeitos presentes numa amostra de cristal líquido nemático.

Para mostrar a equivalência entre a física dos cristais líquidos e a teoria da relatividade geral, precisamos da expressão do escalar de curvatura quadrimensional, tendo em vista que este é apresentado em três dimensões [4]. Para chegarmos a esse escalar de curvatura, vamos colocar um termo a mais, correspondente à variação dinâmica do vetor diretor, na equação (5.16) de maneira que a solução dela seja semelhante à solução da dinâmica da teoria contínua.

O escalar de curvatura quadrimensional é proposto da seguinte maneira:

$$R = \frac{9e^2S^2}{2[(3 - e(1 - S))]^2} [\mathbf{n} \cdot \nabla_x \mathbf{n}]^2 - \frac{3eS}{[(3 - e(1 - S))]^2} \nabla \cdot [\mathbf{n} \nabla \cdot \mathbf{n} + \mathbf{n} \times \nabla_x \mathbf{n}] + \lambda_1 \mathbf{n} \cdot \dot{\mathbf{n}} \quad (6.37)$$

Em uma região onde não há massa e considerando a dinâmica bidimensional do vetor diretor no plano  $xy$  temos:

$$0 = -\frac{3eS}{[(3 - e(1 - S))]} \nabla \cdot [\mathbf{n} \nabla \cdot \mathbf{n} + \mathbf{n} \times \nabla \times \mathbf{n}] + \lambda_1 \mathbf{n} \cdot \dot{\mathbf{n}} \quad (6.38)$$

Substituindo a (6.6) na (6.38) temos:

$$0 = -\frac{3eS}{[(3 - e(1 - S))]} [(\nabla \cdot \mathbf{n})^2 + (\nabla \times \mathbf{n})^2 + \mathbf{n} \cdot (\nabla^2 \mathbf{n})] + \lambda_1 \mathbf{n} \cdot \dot{\mathbf{n}} \quad (6.39)$$

Multiplicando a equação anterior pelo vetor diretor  $\mathbf{n}$  e levando em conta de que  $\mathbf{n} \cdot \mathbf{n} = 1$ , temos:

$$\begin{aligned} \frac{3eS}{[(3 - e(1 - S))]} \nabla^2 \mathbf{n} - \lambda_1 \dot{\mathbf{n}} \\ = -\mathbf{n} [(\nabla \cdot \mathbf{n})^2 + (\nabla \times \mathbf{n})^2] \frac{3eS}{[(3 - e(1 - S))]} \end{aligned} \quad (6.40)$$

Inserindo as equações (6.8) e (6.9) na (6.40) tem-se:

$$\begin{aligned} \frac{3eS}{[(3 - e(1 - S))]} (\nabla^2 n_x \mathbf{i} + \nabla^2 n_y \mathbf{j}) - \lambda_1 (\dot{n}_x \mathbf{i} + \dot{n}_y \mathbf{j}) \\ = - (n_x \mathbf{i} + n_y \mathbf{j}) [(\nabla \cdot \mathbf{n})^2 + (\nabla \times \mathbf{n})^2] \frac{3eS}{[(3 - e(1 - S))]} \end{aligned} \quad (6.41)$$

Esta equação pode ser escrita como:

$$\frac{3eS}{[(3 - e(1 - S))]} \nabla^2 n_x - \lambda_1 \dot{n}_x = -n_x [(\nabla \cdot \mathbf{n})^2 + (\nabla \times \mathbf{n})^2] \frac{3eS}{[(3 - e(1 - S))]} \quad (6.42)$$

$$\frac{3eS}{[(3 - e(1 - S))]} \nabla^2 n_y - \lambda_1 \dot{n}_y = -n_y [(\nabla \cdot \mathbf{n})^2 + (\nabla \times \mathbf{n})^2] \frac{3eS}{[(3 - e(1 - S))]} \quad (6.43)$$



Dividindo a (6.42) pela (6.43) temos como resultado:

$$\frac{3eS}{[(3 - e(1 - S))]} [n_y \nabla^2 n_x - n_x \nabla^2 n_y] - \lambda_1 [n_y \dot{n}_x - n_x \dot{n}_y] = 0 \quad (6.44)$$

Substituindo as equações (6.13) e (6.14) na equação anterior chega-se a:

$$\begin{aligned} \frac{3eS}{[(3 - e(1 - S))]} [n_y (\partial_x \partial_x n_x + \partial_y \partial_y n_x) - n_x (\partial_x \partial_x n_y + \partial_y \partial_y n_y)] - \lambda_1 [n_y \dot{n}_x - n_x \dot{n}_y] \\ = 0 \quad (6.45) \end{aligned}$$

Inserindo nesta equação as componentes  $n_x$  e  $n_y$  e a taxa de variação temporal destas, chegamos a:

$$\nabla^2 \varphi = \frac{[(3 - e(1 - S))]}{3eS} \lambda_1 \frac{\partial \varphi}{\partial t} \quad (6.46)$$

Esta equação é semelhante a (6.33), onde podemos perceber que a constante elástica depende de quantidades, que foram já discutidas nos capítulos anteriores, como: excentricidade  $e$  e parâmetro de ordem escalar  $S$ . Logo:

$$k = \frac{[(3 - e(1 - S))]}{3eS} \quad (6.47)$$

Para a dinâmica tridimensional do vetor diretor e numa região onde não tem massa, temos:

$$\begin{aligned} \nabla^2 \mathbf{n} - \frac{[(3 - e(1 - S))]}{3eS} \lambda_1 \dot{\mathbf{n}} \\ = - \mathbf{n} \left[ (\nabla \cdot \mathbf{n})^2 + \left( \frac{6 - e(S + 2)}{6 - 2e(1 - S)} \right) (\nabla_x \mathbf{n})^2 \right] \quad (6.48) \end{aligned}$$

onde as componentes do laplaciano que atuam nas componentes do vetor diretor são escritas como:

$$\begin{aligned} \partial_x \partial_x n_x + \partial_y \partial_y n_x + \partial_z \partial_z n_x - \frac{[(3 - e(1 - S))]}{3eS} \lambda_1 \dot{n}_x \\ = -n_x \left[ (\nabla \cdot \mathbf{n})^2 + \left( \frac{6 - e(S + 2)}{6 - 2e(1 - S)} \right) (\nabla x \mathbf{n})^2 \right] \end{aligned} \quad (6.49)$$

$$\begin{aligned} \partial_x \partial_x n_y + \partial_y \partial_y n_y + \partial_z \partial_z n_y - \frac{[(3 - e(1 - S))]}{3eS} \lambda_1 \dot{n}_y \\ = -n_y \left[ (\nabla \cdot \mathbf{n})^2 + \left( \frac{6 - e(S + 2)}{6 - 2e(1 - S)} \right) (\nabla x \mathbf{n})^2 \right] \end{aligned} \quad (6.50)$$

$$\begin{aligned} \partial_x \partial_x n_z + \partial_y \partial_y n_z + \partial_z \partial_z n_z - \frac{[(3 - e(1 - S))]}{3eS} \lambda_1 \dot{n}_z \\ = -n_z \left[ (\nabla \cdot \mathbf{n})^2 + \left( \frac{6 - e(S + 2)}{6 - 2e(1 - S)} \right) (\nabla x \mathbf{n})^2 \right] \end{aligned} \quad (6.51)$$

As derivadas temporais das componentes do vetor diretor são:

$$\dot{n}_x = \sin\theta \cos\varphi \dot{\varphi} + \sin\varphi \cos\theta \dot{\theta}$$

$$\dot{n}_y = -\sin\theta \sin\varphi \dot{\varphi} + \cos\varphi \cos\theta \dot{\theta}$$

$$\dot{n}_z = -\sin\theta \dot{\theta}$$

Substituindo essas relações e o valor das componentes  $n_x$ ,  $n_y$  e  $n_z$ , obtemos as seguintes soluções:

$$\nabla^2 \theta - \sin\theta \cos\theta (\nabla \varphi)^2 = \frac{[(3 - e(1 - S))]}{3eS} \lambda_1 \dot{\theta} \quad (6.52)$$

$$\nabla^2 \theta + 2\cos\theta (\nabla \theta \cdot \nabla \varphi) = \frac{[(3 - e(1 - S))]}{3eS} \lambda_1 \sin\theta \dot{\varphi} \quad (6.53)$$

Como esperado, essas duas equações são semelhantes a (6.35) e (6.36) onde a constante elástica é dada pela equação (6.47).

## CONCLUSÕES E PERSPECTIVAS FUTURAS

Partindo da ideia de que as equações do campo gravitacional, descrita pela teoria da relatividade geral e a que descreve as texturas dos cristais líquidos apresentam semelhanças, a partir do ponto de vista matemático, chegamos às equações que descreve as configurações estáticas do vetor diretor em torno dos defeitos resolvendo a equação de Einstein dos cristais líquidos nemáticos, utilizando as componentes do vetor bidimensional e tridimensional.

Chegamos nestes resultados, considerado que o tensor stress, responsável pela curvatura em uma amostra nemática, como sendo nulo. A partir de então, obtemos as mesmas equações diferenciais acopladas, que também são deduzidas na teoria contínua dos cristais líquidos nemáticos. A solução destas equações descreve a configuração do vetor diretor ao redor de um defeito.

Tendo estes resultados como base, neste trabalho foi feito ainda uma suposição que consiste na introdução de um termo a mais no escalar de curvatura, corresponde ao tempo, deixando-o quadrimensional. E quando resolvido para os casos particulares do diretor, encontramos as equações que descreve as configurações dinâmicas do diretor.

Estes resultados apresentados deixam bastante claro que realmente há conexão entre a teoria da relatividade geral e as equações que descrevem as texturas dos cristais líquidos nemáticos, a partir do momento que resolvemos a equação de Einstein dos cristais líquidos utilizando as componentes do vetor diretor.

Para trabalhos futuros, pretendemos adicionar um termo na métrica dos cristais líquidos correspondente ao tempo com finalidade de obter o mesmo escalar de curvatura proposto neste trabalho, via álgebra tensorial.

## APÊNDICE

### Tensores

Grandezas físicas como, densidade, pressão e temperatura são as mesmas em qualquer sistema de coordenadas, ou seja, elas como grandezas escalares e requer apenas um número (intensidade). Ao passo que as grandezas vetoriais (aceleração, velocidade, força etc.) precisam de três números (intensidade, direção e sentido). Os tensores são generalizações dos vetores e escalares. Caracterizamos essa generalização através da “ordem”. Assim, um escalar é definido formalmente como sendo um tensor de ordem 0 (zero). Por sua vez, um vetor é definido como sendo um tensor de ordem 1 (um). Logo, qualquer outro elemento que seja de ordem superior é chamado de ordem  $n$  [57].

Os tensores são empregados para que as equações físicas sejam invariantes sob transformação de coordenadas e é de extrema importância na teoria da relatividade geral, na teoria do eletromagnetismo e nos cristais líquidos e em outros ramos da física.

#### A.1 Transformação de Coordenadas

Em um espaço Euclidiano tridimensional, as coordenadas de um ponto são  $(x, y, z)$  onde  $x, y$  e  $z$  são números reais. É interessante escrever  $(x^1, x^2, x^3)$  para as coordenadas  $(x, y, z)$  ou  $x^i$  onde  $i = 1, 2, 3$ . Generalizando para um espaço de  $n$ - dimensões, as coordenadas do ponto são de  $n$  variáveis independentes  $(x^1, x^2, \dots, x^n)$  em  $X$  coordenadas. Seja  $(x'^1, x'^2, \dots, x'^n)$  em coordenadas curvilíneas, a coordenada do mesmo ponto no sistema de coordenada  $Y$  e função única independente de  $(x^1, x^2, \dots, x^n)$  de modo que [56]:

$$x'^1 = x'^1(x^1, x^2, \dots, x^n)$$

$$x'^2 = x'^2(x^1, x^2, \dots, x^n)$$

$$x'^3 = x'^3(x^1, x^2, \dots, x^n)$$

$$\vdots \qquad \qquad \qquad \vdots$$

$$x'^n = x'^n(x^1, x^2, \dots, x^n)$$

ou,

$$x'^i = x'^i(x^1, x^2, \dots, x^n), \quad i = 1, 2, \dots, n \quad (A.1)$$

Pode-se escrever  $x^i$  como funções de  $x'^1, x'^2, \dots, x'^n$ , logo:

$$x^i = x^i(x'^1, x'^2, \dots, x'^n) \quad i = 1, 2, \dots, n \quad (A.2)$$

## A.2 Vetor Covariante e Contravariante (Tensor de 1ª Ordem)

Considerando a transformação de um sistema de coordenada apresentada na equação (A.1) as suas diferenciais se transforma segundo a lei [56]:

$$dx'^i = \frac{\partial x'^i}{\partial x^j} dx^j \quad (A.3)$$

onde esta equação representa o deslocamento infinitesimal de um vetor contravariante [57].

Seja  $U^i$  um vetor que pode ser escrito como  $(U^1, U^2, \dots, U^n)$  com  $i = 1, 2, \dots, n$  que sejam funções de  $n$  coordenadas  $(x^1, x^2, \dots, x^n)$  em coordenadas  $X$  de um sistema. O vetor  $U^i$  é transformado para  $U'^i$  num sistema de coordenada  $Y$  de acordo com a lei de transformação:

$$U'^i = \frac{\partial x'^i}{\partial x^j} U^j \quad (A.4)$$

onde,  $U^i$  é chamado de componentes do vetor contravariante (Quadri-vetor contravariante) [45].

Seja  $\varphi$  uma função escalar de coordenadas  $(x^1, x^2, \dots, x^n)$  ou  $x^i$  em um sistema de coordenadas  $X$  e  $(x'^1, x'^2, \dots, x'^n)$  ou  $x'^i$  são coordenadas em um sistema de coordenadas  $Y$ . Considerando a transformação de um sistema de coordenada de  $x^i \rightarrow x'^i$ , a lei de transformação da função escalar é dada por [56]:

$$\frac{\partial \varphi}{\partial x'^i} = \frac{\partial x^j}{\partial x'^i} \frac{\partial \varphi}{\partial x^j} \quad (A.5)$$

Observe na equação (A.5) que as derivadas parciais  $\partial x^j / \partial x'^i$  aparecem em lugar trocado quando se observa a equação (A.3). Como foi definido na equação (A.3) um vetor contravariante, logo pode definir na equação (A.5) um do tipo vetor covariante. Um exemplo de vetor covariante é vetor gradiente [45].

Seja  $U_i$  um vetor que pode ser escrito como  $(U_1, U_2, \dots, U_n)$  com  $i = 1, 2, \dots, n$  que sejam funções de  $n$  coordenadas  $(x^1, x^2, \dots, x^n)$  em coordenadas  $X$  de um sistema. O vetor  $U_i$  é transformado para  $U'_i$  num sistema de coordenada  $Y$  de acordo com a lei de transformação [56]:

$$U'_i = \frac{\partial x^j}{\partial x'^i} U_j \quad (A.6)$$

onde  $U_i$  é chamado de componentes do vetor covariante (Quadri-vetor-covariante) [45].

Em um sistema de coordenadas cartesianas não há diferença entre os vetores covariantes e contravariantes e as regras de ambas tornam-se equivalentes [45].

### A.3 Tensor Contravariante de 2ª Ordem

Seja  $U^{ij}$  as componentes de um tensor contravariante de 2ª ordem com  $(i, j = 1, 2, \dots, n)$ , ter  $n^2$  funções de coordenadas  $(x^1, x^2, \dots, x^n)$  em um sistema de coordenadas  $X$ ,  $U^{ij}$  será transformado para  $U'^{ij}$  com coordenadas  $(x'^1, x'^2, \dots, x'^n)$  em um sistema de coordenadas de  $Y$  de acordo com a lei de transformação [56]:

$$U'^{ij} = \frac{\partial x'^i}{\partial x^k} \frac{\partial x'^j}{\partial x^l} U^{kl} \quad (A.7)$$

### A.4 Tensor Covariante de 2ª Ordem

Seja  $U_{ij}$  as componentes de um tensor covariante de 2ª ordem com  $(i, j = 1, 2, \dots, n)$ , ter  $n^2$  funções de coordenadas  $(x^1, x^2, \dots, x^n)$  em um sistema de coordenadas  $X$ ,  $U_{ij}$  será transformado para  $U'_{ij}$  com coordenadas  $(x'^1, x'^2, \dots, x'^n)$  em um sistema de coordenadas  $Y$  de acordo com a lei de transformação [56]:

$$U'_{ij} = \frac{\partial x^k}{\partial x'^i} \frac{\partial x^l}{\partial x'^j} U_{kl} \quad (A.8)$$

### A.5 Tensor Misto de 2ª Ordem

Como os tensores covariantes e contravariantes já estão definidos, os tensores mistos é consequência, tendo em vista que este é composto por índices covariantes e contravariantes. Seja  $U_j^i$  as componentes de um tensor misto de 2ª ordem com  $(i, j = 1, 2, \dots, n)$ , ter  $n^2$  funções de coordenadas  $(x^1, x^2, \dots, x^n)$  em um sistema de coordenadas  $X$ ,  $U_j^i$  será transformado



para  $U_j'^i$  com coordenadas  $(x'^1, x'^2, \dots, x'^n)$  em um sistema de coordenadas  $Y$  de acordo com a lei de transformação [56]:

$$U_j'^i = \frac{\partial x'^i}{\partial x^k} \frac{\partial x^l}{\partial x'^j} U_l^k \quad (A.9)$$

Seguindo o mesmo raciocínio, podem-se obter tensores de ordem superiores como, por exemplo, tensor misto de 3ª ordem e que se transformam de acordo com a lei de transformação:

$$U_{js}^i = \frac{\partial x^l}{\partial x'^j} \frac{\partial x^m}{\partial x'^s} \frac{\partial x'^i}{\partial x^k} U_{lm}^k \quad (A.10)$$

e,

$$U_s'^{ij} = \frac{\partial x'^i}{\partial x^k} \frac{\partial x'^j}{\partial x^l} \frac{\partial x^m}{\partial x^s} U_m^{kl} \quad (A.11)$$

Observe na equação (A.10) que as componentes desse tensor misto apresentam um índice contravariante e dois contravariantes, sendo que esse tensor é do tipo  $\frac{1}{2}$  e já na equação (A.11) tem-se um tensor do tipo  $\frac{2}{1}$ . Os tensores covariantes e contravariante podem ser casos particulares de tensores mistos como, por exemplo: tensor covariante de 2ª ordem é do tipo  $\frac{0}{2}$  e tensor contravariante de 3ª ordem é do tipo  $\frac{3}{0}$  [57].

É importante destacar a **delta de Kronecker** (tensor invariante unitário) [45] que é mais bem representado como  $\delta_j^i$  pois é um tensor de 2ª ordem do tipo  $\frac{1}{1}$ .

$$\delta_j^i = \frac{\partial x'^i}{\partial x'^j} = \frac{\partial x'^i}{\partial x^k} \frac{\partial x^k}{\partial x'^j} = \frac{\partial x'^i}{\partial x^k} \frac{\partial x^l}{\partial x'^j} \delta_l^k \quad (A.12)$$

Lembrando que a definição do delta de Kronecker é:

$$\delta_j^i = \begin{cases} 1, & \text{se } i = j \\ 0, & \text{se } i \neq j \end{cases}$$

Se  $U^i$  é um vetor, contraindo com  $\delta_i^k$  obtemos [45]:

$$U^i \delta_i^k = U^k \quad (\text{A.13})$$

## A.6 Conjugado do tensor simétrico

Seja  $U_{ij}$  um tensor covariante simétrico de 2ª ordem, o determinante desse tensor é  $|U_{ij}| \neq 0$ . O tensor contravariante  $U^{ij}$  é definido por:

$$U^{ij} = \frac{\mathcal{B}_{ij}}{|U_{ij}|} \quad (\text{A.14})$$

Onde  $\mathcal{B}_{ij}$  é co-fator de  $U_{ij}$  nesse determinante [56,57]. Utilizando as propriedades do determinante chega-se a dois resultados:

$$(i) \quad U_{ij} \mathcal{B}_{ij} = |U_{ij}| \Rightarrow U_{ij} \underbrace{\frac{\mathcal{B}_{ij}}{|U_{ij}|}}_{U^{ij}} = 1 \Rightarrow U_{ij} U^{ij} = 1$$

$$(ii) \quad U_{ij} \mathcal{B}_{kj} = 0 \Rightarrow U_{ij} \underbrace{\frac{\mathcal{B}_{kj}}{|U_{ij}|}}_{U^{kj}} = 0 \Rightarrow U_{ij} U^{ij} = 0$$

Observando os resultados (i) e (ii), chega-se a conclusão de que [56]

$$U_{ij}U^{kj} = \begin{cases} 1, & \text{se } i = k \\ 0, & \text{se } i \neq k \end{cases}$$

Ou seja:

$$U_{ij}U^{kj} = \delta_i^k \quad (A.15)$$

## A.7 Tensor métrico e métrica Riemanniana

O tensor métrico, é um tensor simétrico positivo de ordem 2 e que é usado para medir a distância em um espaço e também descrever a geometria desse espaço.

### A.7.1 Tensor métrico covariante

Em coordenadas cartesianas, a distância entre dois pontos vizinhos  $(x, y, z)$  e  $(x + dx, y + dy, z + dz)$  é dado por [56]:

$$ds^2 = dx^2 + dy^2 + dz^2 \quad (A.16)$$

No espaço de N dimensões, a distância entre dois pontos vizinhos  $x'^i$  e  $x'^i + dx'^i$  em que  $(i = 1, 2, \dots, n)$  é dado por:

$$ds^2 = dx'^i dx'^i \quad (3.17)$$

Substituindo a equação (A.3) na equação (A.17) obtemos [57]:

$$ds^2 = g_{jk} dx^j dx^k \quad (A.18)$$

Esta equação representa uma expressão geral da forma quadrática dos diferenciais, simplesmente chamada de métrica ou tensor métrico covariante, onde:

$$g_{jk} \equiv \frac{\partial x'^i}{\partial x^j} \frac{\partial x'^i}{\partial x^k} \quad (A.19)$$

### A.7.2 Tensor métrico contravariante

O tensor métrico contravariante é definido por:

$$g^{jk} = \frac{\mathcal{B}_{jk}}{g} \quad (A.20)$$

Onde  $g \equiv |g_{jk}| \neq 0$  é o determinante do tensor métrico e  $\mathcal{B}_{jk}$  é o co-fator de  $g^{jk}$  nesse determinante. Utilizando os mesmos procedimentos utilizados para obter à equação (A.15), chega-se numa relação entre o tensor métrico covariante e contravariante [57]:

$$g_{ij} g^{jk} = \delta_i^k \quad (A.21)$$

Num sistema de coordenadas cartesianas, não há diferença entre vetores covariantes e contravariantes, entretanto, essa diferença aparece quando passamos para coordenadas curvilíneas e ele pode ser representado sob a forma de covariante ou contravariante. O tensor métrico tem grande importância que é de permitir passar das componentes covariantes de um vetor para suas componentes contravariantes e vice-versa [45]. Logo:

$$U^i = g^{ik} U_k \quad (A.22)$$

Ou,

$$U_i = g_{ik}U^k \quad (A.23)$$

Num sistema de coordenadas cartesiana  $g_{ik} = \delta_{ik}$ . Essas regras apresentadas nas equações (A.22) e (A.23) também se aplicam aos tensores [45]. Assim,

$$U_{kl}^i = g_{ln}U_k^{in} \quad \text{ou} \quad U^{ik} = g^{il}g^{kn}U_{ln} \quad (A.24)$$

Em coordenadas cartesianas o quadrado do valor absoluto de um vetor é igual à soma dos quadrados de suas componentes e em coordenadas curvilíneas o quadrado do valor de um vetor é um escalar, ou seja,

$$U_iU^i = U_kU^k = g_{ik}U^iU^k = g^{ik}U_iU_k \quad (A.25)$$

Os índices mudos ou índices de soma têm certa mobilidade para levantar ou abaixar [45]. Assim,

$$U_{im}U^{im} = U^{im}U_{im} \quad \text{ou} \quad U_{im}U^{il} = U_m^iU_i^l \quad (A.26)$$

## A.8 Equação da Geodésica

A menor curva que une dois pontos fixos  $P_1$  e  $P_2$  é chamada de geodésica. Essa curva possui uma parametrização em relação a um parâmetro  $t$  [57], logo:

$$x^i = x^i(t), \quad t \in [t_1, t_2] \quad (A.27)$$

O elemento infinitesimal de comprimento é dado por:

$$ds = \sqrt{ds^2} \quad (A.28)$$

Substituindo a equação (A.18) em (A.28) obtemos:

$$ds = \sqrt{g_{jk} dx^j dx^k} \quad (A.29)$$

Derivando esta equação em relação ao tempo,

$$ds = \sqrt{g_{jk} \dot{x}^j \dot{x}^k} dt \quad (A.30)$$

O seu comprimento de arco no intervalo  $[t_1, t_2]$  é dado por:

$$\mathcal{L} = \int_{t_1}^{t_2} \dot{s} dt \quad (A.31)$$

Onde,

$$\dot{s} \equiv \sqrt{g_{jk} \dot{x}^j \dot{x}^k} \quad (A.32)$$

A equação da geodésica parametrizada que minimizam a integral e fornece comprimento de arco  $\mathcal{L}$  é dada pela equação de Euler-Lagrange:

$$\frac{d}{dt} \left( \frac{\partial \dot{s}}{\partial \dot{x}^l} \right) - \frac{\partial \dot{s}}{\partial x^l} = 0 \quad (A.33)$$

Derivando parcialmente a equação (A.33) em relação  $\dot{x}^l$  obtemos:

$$\frac{\partial \dot{s}}{\partial \dot{x}^l} = \frac{\partial \sqrt{g_{jk} \dot{x}^j \dot{x}^k}}{\partial \dot{x}^l} = \frac{1}{2\sqrt{g_{jk} \dot{x}^j \dot{x}^k}} \frac{\partial (g_{jk} \dot{x}^j \dot{x}^k)}{\partial \dot{x}^l} \quad (A.34)$$

Como  $g_{jk}$  não depende explicitamente de  $\dot{x}^l$ , logo:

$$\frac{\partial \dot{s}}{\partial \dot{x}^l} = \frac{g_{jk}}{2\dot{s}} \left( \frac{\partial \dot{x}^j}{\partial \dot{x}^l} \dot{x}^k + \frac{\partial \dot{x}^k}{\partial \dot{x}^l} \dot{x}^j \right) \quad (A.35)$$

Temos que,

$$\delta_l^j = \frac{\partial \dot{x}^j}{\partial \dot{x}^l} \quad e \quad \delta_l^k = \frac{\partial \dot{x}^k}{\partial \dot{x}^l} \quad (A.36)$$

Substituindo essas relações na equação (A.35), obtemos:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \dot{s}}{\partial \dot{x}^l} &= \frac{g_{jk}}{2\dot{s}} (\delta_l^j \dot{x}^k + \delta_l^k \dot{x}^j) = \frac{g_{jk} \delta_l^j \dot{x}^k + g_{jk} \delta_l^k \dot{x}^j}{2\dot{s}} = \frac{g_{lk} \dot{x}^k + g_{jl} \dot{x}^j}{2\dot{s}} = \frac{2g_{jl} \dot{x}^j}{2\dot{s}} \\ &= \frac{\partial \dot{s}}{\partial \dot{x}^l} = \frac{g_{jl} \dot{x}^j}{\dot{s}} \quad (3.37) \end{aligned}$$

Derivando parcialmente a equação (A.32) em relação  $x^l$  chega-se:

$$\frac{\partial \dot{s}}{\partial x^l} = \frac{1}{2\dot{s}} \frac{\partial (g_{jk} \dot{x}^j \dot{x}^k)}{\partial x^l} = \frac{1}{2\dot{s}} \frac{\partial g_{jk}}{\partial x^l} \dot{x}^j \dot{x}^k \quad (\text{A.38})$$

Substituindo a equação (A.37) e (A.38) na equação (A.33):

$$\frac{d}{dt} \left( \frac{g_{lj} \dot{x}^j}{\dot{s}} \right) - \frac{1}{2\dot{s}} \frac{\partial g_{jk}}{\partial x^l} \dot{x}^j \dot{x}^k = 0 \quad (\text{A.39})$$

Fazendo a mudança de parâmetro em que  $ds = dt$ , isto é  $\dot{s} = 1$  e  $\ddot{s} = 0$  [57], a equação (A.39) assume a seguinte forma:

$$\begin{aligned} \frac{d}{ds} \left( g_{lj} \frac{dx^j}{ds} \right) - \frac{1}{2} \frac{\partial g_{jk}}{\partial x^l} \frac{dx^j}{ds} \frac{dx^k}{ds} &= g_{lj} \frac{d^2 x^j}{ds^2} + \frac{dg_{lj}}{ds} \frac{dx^j}{ds} - \frac{1}{2} \frac{\partial g_{jk}}{\partial x^l} \frac{dx^j}{ds} \frac{dx^k}{ds} \\ &= 0 \end{aligned} \quad (\text{A.40})$$

Observando o segundo termo do membro direito da equação (A.40) ele pode ser escrito da seguinte forma:

$$\frac{dg_{lj}}{ds} \frac{dx^j}{ds} = \frac{\partial g_{lj}}{\partial x^k} \frac{dx^j}{ds} \frac{dx^k}{ds} = \frac{1}{2} \frac{\partial g_{lj}}{\partial x^k} \frac{dx^k}{ds} \frac{dx^j}{ds} + \frac{1}{2} \frac{\partial g_{lk}}{\partial x^j} \frac{dx^j}{ds} \frac{dx^k}{ds} \quad (\text{A.41})$$

Substituindo a equação (A.41) em (A.40):



$$g_{lj} \frac{d^2 x^j}{ds^2} + \frac{1}{2} \frac{\partial g_{lj}}{\partial x^k} \frac{dx^k}{ds} \frac{dx^j}{ds} + \frac{1}{2} \frac{\partial g_{lk}}{\partial x^j} \frac{dx^j}{ds} \frac{dx^k}{ds} - \frac{1}{2} \frac{\partial g_{jk}}{\partial x^l} \frac{dx^j}{ds} \frac{dx^k}{ds} = 0 \quad (A.42)$$

Organizando-a obtemos:

$$g_{lj} \frac{d^2 x^j}{ds^2} + \frac{1}{2} \left( \frac{\partial g_{lj}}{\partial x^k} + \frac{\partial g_{lk}}{\partial x^j} - \frac{\partial g_{jk}}{\partial x^l} \right) \frac{dx^j}{ds} \frac{dx^k}{ds} = 0 \quad (A.43)$$

É introduzida na equação (A.43) uma quantidade chamada de Símbolo de Christoffel de 1ª espécie [57]:

$$\Gamma_{jk,l} = \frac{1}{2} \left( \frac{\partial g_{lj}}{\partial x^k} + \frac{\partial g_{lk}}{\partial x^j} - \frac{\partial g_{jk}}{\partial x^l} \right) \quad (A.44)$$

Substituindo a equação (A.44) em (A.43):

$$g_{lj} \frac{d^2 x^j}{ds^2} + \Gamma_{jk,l} \frac{dx^j}{ds} \frac{dx^k}{ds} = 0 \quad (A.45)$$

Multiplicando-a por  $g^{nl}$  obtemos:

$$\underbrace{g^{nl} g_{lj}}_{\delta_j^n} \frac{d^2 x^j}{ds^2} + g^{nl} \Gamma_{jk,l} \frac{dx^j}{ds} \frac{dx^k}{ds} = 0 \quad (A.46)$$

Onde  $\Gamma_{jk}^n = g^{nl} \Gamma_{jk,l}$  é Símbolo de Christoffel de 2ª espécie:

Logo:

$$\delta_j^n \frac{d^2 x^j}{ds^2} + \Gamma_{jk}^n \frac{dx^j}{ds} \frac{dx^k}{ds} = 0 \quad (A.47)$$

Fazendo  $j = n$ , obtemos:

$$\frac{d^2 x^n}{ds^2} + \Gamma_{jk}^n \frac{dx^j}{ds} \frac{dx^k}{ds} = 0 \quad (A.48)$$

A equação (A.48) é conhecida como **equação da geodésica** da qual a solução fornece a parametrização  $x^n(s)$  da geodésica no espaço que é caracterizado pelo tensor métrico ou métrica [57].

## A.9 Lei de transformação dos símbolos de Christoffel

Seja o símbolo de Christoffel  $\Gamma'_{jk,l}$  no sistema de coordenadas  $x'^n$ :

$$\Gamma'_{jk,l} = \frac{1}{2} \left( \frac{\partial g'_{lj}}{\partial x'^k} + \frac{\partial g'_{lk}}{\partial x'^j} - \frac{\partial g'_{jk}}{\partial x'^l} \right) \quad (A.49)$$

E que será obtido em um sistema de coordenadas  $x^n$  e para isso será necessário trabalhar com os termos entre parênteses. Seja:

$$\frac{\partial g'_{lj}}{\partial x'^k} = \frac{\partial}{\partial x'^k} \left( g_{pq} \frac{\partial x^p}{\partial x'^l} \frac{\partial x^q}{\partial x'^j} \right) \Rightarrow$$

Em que:

$$g'_{ij} = g_{pq} \frac{\partial x^p}{\partial x'^i} \frac{\partial x^q}{\partial x'^j} \quad (A.50)$$

É o tensor métrico covariante escrito em um sistema de coordenadas  $x'^n$  a partir do sistema de coordenadas  $x^n$ . Portanto:

$$\frac{\partial g'_{lj}}{\partial x'^k} = \frac{\partial g_{pq}}{\partial x^i} \frac{\partial x^i}{\partial x'^k} \frac{\partial x^p}{\partial x'^l} \frac{\partial x^q}{\partial x'^j} + g_{pq} \left( \frac{\partial^2 x^p}{\partial x'^k \partial x'^l} \frac{\partial x^q}{\partial x'^j} + \frac{\partial^2 x^q}{\partial x'^k \partial x'^j} \frac{\partial x^p}{\partial x'^l} \right) \quad (\text{A.51})$$

Fazendo as permutações dos índices  $k \leftrightarrow j$  obtém:

$$\frac{\partial g'_{lk}}{\partial x'^j} = \frac{\partial g_{pq}}{\partial x^i} \frac{\partial x^i}{\partial x'^j} \frac{\partial x^p}{\partial x'^l} \frac{\partial x^q}{\partial x'^k} + g_{pq} \left( \frac{\partial^2 x^p}{\partial x'^j \partial x'^l} \frac{\partial x^q}{\partial x'^k} + \frac{\partial^2 x^q}{\partial x'^j \partial x'^k} \frac{\partial x^p}{\partial x'^l} \right) \quad (\text{A.52})$$

E para  $l \leftrightarrow j$  obtém:

$$\frac{\partial g'_{jk}}{\partial x'^l} = \frac{\partial g_{pq}}{\partial x^i} \frac{\partial x^i}{\partial x'^l} \frac{\partial x^p}{\partial x'^j} \frac{\partial x^q}{\partial x'^k} + g_{pq} \left( \frac{\partial^2 x^p}{\partial x'^l \partial x'^j} \frac{\partial x^q}{\partial x'^k} + \frac{\partial^2 x^q}{\partial x'^l \partial x'^k} \frac{\partial x^p}{\partial x'^j} \right) \quad (\text{A.53})$$

Substituindo as equações (A.51), (A.52) e (A.53) em (A.49) obtemos:

$$\begin{aligned} \Gamma'_{jk,l} &= \frac{1}{2} \left( \frac{\partial g_{pq}}{\partial x^i} \frac{\partial x^i}{\partial x'^k} \frac{\partial x^p}{\partial x'^l} \frac{\partial x^q}{\partial x'^j} + g_{pq} \left( \frac{\partial^2 x^p}{\partial x'^k \partial x'^l} \frac{\partial x^q}{\partial x'^j} + \frac{\partial^2 x^q}{\partial x'^k \partial x'^j} \frac{\partial x^p}{\partial x'^l} \right) \right. \\ &\quad + \frac{\partial g_{pq}}{\partial x^i} \frac{\partial x^i}{\partial x'^j} \frac{\partial x^p}{\partial x'^l} \frac{\partial x^q}{\partial x'^k} + g_{pq} \left( \frac{\partial^2 x^p}{\partial x'^j \partial x'^l} \frac{\partial x^q}{\partial x'^k} + \frac{\partial^2 x^q}{\partial x'^j \partial x'^k} \frac{\partial x^p}{\partial x'^l} \right) \\ &\quad \left. - \frac{\partial g_{pq}}{\partial x^i} \frac{\partial x^i}{\partial x'^l} \frac{\partial x^p}{\partial x'^j} \frac{\partial x^q}{\partial x'^k} - g_{pq} \left( \frac{\partial^2 x^p}{\partial x'^l \partial x'^j} \frac{\partial x^q}{\partial x'^k} + \frac{\partial^2 x^q}{\partial x'^l \partial x'^k} \frac{\partial x^p}{\partial x'^j} \right) \right) \Rightarrow \\ \Gamma'_{jk,l} &= \frac{1}{2} \frac{\partial g_{pq}}{\partial x^i} \frac{\partial x^i}{\partial x'^k} \frac{\partial x^p}{\partial x'^l} \frac{\partial x^q}{\partial x'^j} + \frac{1}{2} \overbrace{\frac{\partial g_{pq}}{\partial x^i} \frac{\partial x^i}{\partial x'^j} \frac{\partial x^p}{\partial x'^l} \frac{\partial x^q}{\partial x'^k}}^{i \leftrightarrow p} - \frac{1}{2} \overbrace{\frac{\partial g_{pq}}{\partial x^i} \frac{\partial x^i}{\partial x'^l} \frac{\partial x^p}{\partial x'^j} \frac{\partial x^q}{\partial x'^k}}^{i,p,q \rightarrow q,i,p} \\ &\quad + g_{pq} \frac{\partial^2 x^p}{\partial x'^k \partial x'^l} \frac{\partial x^q}{\partial x'^j} \Rightarrow \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\Gamma'_{jk,l} &= \frac{1}{2} \frac{\partial g_{pq}}{\partial x^i} \frac{\partial x^i}{\partial x'^k} \frac{\partial x^p}{\partial x'^l} \frac{\partial x^q}{\partial x'^j} + \frac{1}{2} \frac{\partial g_{iq}}{\partial x^p} \frac{\partial x^p}{\partial x'^j} \frac{\partial x^i}{\partial x'^l} \frac{\partial x^q}{\partial x'^k} - \frac{1}{2} \frac{\partial g_{ip}}{\partial x^q} \frac{\partial x^q}{\partial x'^l} \frac{\partial x^i}{\partial x'^j} \frac{\partial x^p}{\partial x'^k} \\ &\quad + g_{pq} \frac{\partial^2 x^p}{\partial x'^k \partial x'^l} \frac{\partial x^q}{\partial x'^j} \quad \Rightarrow \\ \Gamma'_{jk,l} &= \frac{\partial x^i}{\partial x'^k} \frac{\partial x^p}{\partial x'^l} \frac{\partial x^q}{\partial x'^j} \frac{1}{2} \left( \frac{\partial g_{pq}}{\partial x^i} + \frac{\partial g_{iq}}{\partial x^p} - \frac{\partial g_{ip}}{\partial x^q} \right) + g_{pq} \frac{\partial^2 x^p}{\partial x'^k \partial x'^l} \frac{\partial x^q}{\partial x'^j}\end{aligned}$$

Logo:

$$\Gamma'_{jk,l} = \frac{\partial x^i}{\partial x'^k} \frac{\partial x^p}{\partial x'^l} \frac{\partial x^q}{\partial x'^j} \Gamma_{ip,q} + g_{pq} \frac{\partial^2 x^p}{\partial x'^k \partial x'^l} \frac{\partial x^q}{\partial x'^j} \quad (\text{A.54})$$

Esta equação representa a lei de transformação do símbolo de Christoffel de 1ª espécie e que não é um tensor. O símbolo de Christoffel de 2ª espécie no sistema de coordenadas  $x'^m$  em termos de um sistema de coordenadas  $x^n$  é dado por [57]:

$$\Gamma'^n_{jk} = g'^{ml} \Gamma'_{jk,l} \quad (\text{A.55})$$

Substituindo a equação (A.54) em (A.55) obtém:

$$\Gamma'^n_{jk} = g'^{ml} \left( \frac{\partial x^i}{\partial x'^k} \frac{\partial x^p}{\partial x'^l} \frac{\partial x^q}{\partial x'^j} \Gamma_{ip,q} + g_{pq} \frac{\partial^2 x^p}{\partial x'^k \partial x'^l} \frac{\partial x^q}{\partial x'^j} \right) \quad (\text{A.56})$$

onde,

$$g'^{ml} = \frac{\partial x'^m}{\partial x^a} \frac{\partial x'^l}{\partial x^b} g^{ab} \quad (\text{A.57})$$

é o tensor métrico contravariante escrito em um sistema de coordenadas  $x'^m$  a partir do sistema de coordenadas  $x^n$ .

Substituindo a equação (A.57) em (A.56) obtém:

$$\begin{aligned}
\Gamma'^n_{jk} &= \frac{\partial x'^n}{\partial x^a} \frac{\partial x'^l}{\partial x^b} g^{ab} \left( \frac{\partial x^i}{\partial x'^k} \frac{\partial x^p}{\partial x'^l} \frac{\partial x^q}{\partial x'^j} \Gamma_{ip,q} + g_{pq} \frac{\partial^2 x^p}{\partial x'^k \partial x'^l} \frac{\partial x^q}{\partial x'^j} \right) \Rightarrow \\
\Gamma'^n_{jk} &= \frac{\partial x'^n}{\partial x^a} \frac{\partial x^i}{\partial x'^j} \frac{\partial x^p}{\partial x'^k} \underbrace{\frac{\partial x^q}{\partial x'^l} \frac{\partial x^l}{\partial x^b}}_{\delta_b^q} g^{ab} \Gamma_{ip,q} + \frac{\partial x'^n}{\partial x^a} \frac{\partial^2 x^p}{\partial x'^j \partial x'^k} \underbrace{\frac{\partial x^q}{\partial x'^l} \frac{\partial x^l}{\partial x^b}}_{\delta_b^q} g^{ab} g_{pq} \Rightarrow \\
\Gamma'^n_{jk} &= \frac{\partial x'^n}{\partial x^a} \frac{\partial x^i}{\partial x'^j} \frac{\partial x^p}{\partial x'^k} \underbrace{g^{aq} \Gamma_{ip,q}}_{\Gamma_{ip}^a} + \frac{\partial x'^n}{\partial x^a} \frac{\partial^2 x^p}{\partial x'^j \partial x'^k} \underbrace{g^{aq} g_{pq}}_{\delta_p^a} \Rightarrow \\
\Gamma'^n_{jk} &= \frac{\partial x'^n}{\partial x^a} \frac{\partial x^i}{\partial x'^j} \frac{\partial x^p}{\partial x'^k} \Gamma_{ip}^a + \frac{\partial x'^n}{\partial x^p} \frac{\partial^2 x^p}{\partial x'^j \partial x'^k} \quad (A.58)
\end{aligned}$$

Esta equação representa a lei de transformação do símbolo de Christoffel de 2ª espécie e que não é um tensor. Multiplicando a equação (A.56) por  $\frac{\partial x^s}{\partial x'^n}$ , obtemos [57]:

$$\begin{aligned}
\frac{\partial x^s}{\partial x'^n} \Gamma'^n_{jk} &= \frac{\partial x^s}{\partial x'^n} \frac{\partial x'^n}{\partial x^s} \frac{\partial x^i}{\partial x'^j} \frac{\partial x^p}{\partial x'^k} \Gamma_{ip}^s + \frac{\partial x^s}{\partial x'^n} \frac{\partial x'^n}{\partial x^p} \frac{\partial^2 x^p}{\partial x'^j \partial x'^k} \Rightarrow \\
\frac{\partial x^s}{\partial x'^n} \Gamma'^n_{jk} &= \frac{\partial x^i}{\partial x'^j} \frac{\partial x^p}{\partial x'^k} \Gamma_{ip}^s + \delta_p^s \frac{\partial^2 x^p}{\partial x'^j \partial x'^k} \Rightarrow \\
\frac{\partial x^s}{\partial x'^n} \Gamma'^n_{jk} &= \frac{\partial x^i}{\partial x'^j} \frac{\partial x^p}{\partial x'^k} \Gamma_{ip}^s + \frac{\partial^2 x^s}{\partial x'^j \partial x'^k} \Rightarrow
\end{aligned}$$

Onde:

$$\frac{\partial^2 x^s}{\partial x'^j \partial x'^k} = \frac{\partial x^s}{\partial x'^n} \Gamma'^n_{jk} - \frac{\partial x^i}{\partial x'^j} \frac{\partial x^p}{\partial x'^k} \Gamma_{ip}^s \quad (A.59)$$

Esta é equação da derivada segunda de  $x^s$  em relação à  $x'^s$  em termos do símbolo de Christoffel [56].

## A.10 Derivada Covariante

Em coordenadas cartesianas as diferenciais de um vetor formam um vetor e as diferenciais parciais de suas componentes formam um tensor, o mesmo não ocorre em coordenadas curvilíneas. Isto é devido ao fato de que as diferenciais de vetores (diferença de vetores) se encontram em pontos diferentes (infinitamente vizinho) do espaço e os vetores se transformam diferentemente, pois sabemos que os coeficientes das equações de transformação (A.4) e (A.6) são funções das coordenadas. A idéia é procurar um tensor que desempenha, em coordenadas curvilíneas, o mesmo papel que o tensor em coordenadas cartesianas. Em coordenadas curvilíneas, para que a diferencial de um vetor seja um vetor, é preciso que os dois vetores se encontrem no mesmo ponto do espaço (transportar um dos dois vetores onde se encontra o outro e só depois disso é que pode efetuar a diferença dos dois vetores). O deslocamento de um vetor paralelo a si mesmo em que suas componentes cartesianas não variam e se utilizarmos coordenadas curvilíneas suas componentes geralmente variam. Assim, em coordenadas curvilíneas a diferença das componentes dos dois vetores depois do transporte de um deles até o ponto onde se encontra o outro, não coincide com sua diferença antes do transporte. As diferenciais de vetores que se encontram no mesmo ponto logo após do transporte é apresenta a seguir [45].

### A.10.1 Derivada covariante de um vetor covariante

Seja  $U_k$  e  $U'_k$  as componentes do vetor covariante em um sistema de coordenadas  $x^n$  e  $x'^n$  respectivamente [56]. Logo:

$$U'_k = \frac{\partial x^p}{\partial x'^k} U_p \quad (A.60)$$

Diferenciando parcialmente esta equação em relação  $x'^j$  obtemos:

$$\frac{\partial U'_k}{\partial x'^j} = \frac{\partial^2 x^p}{\partial x'^j \partial x'^k} U_p + \frac{\partial x^p}{\partial x'^k} \frac{\partial U_p}{\partial x^q} \frac{\partial x^q}{\partial x'^j} \quad (\text{A. 61})$$

Permutando  $p$  por  $s$  no primeiro termo do lado direito obtemos:

$$\frac{\partial U'_k}{\partial x'^j} = \frac{\partial^2 x^s}{\partial x'^j \partial x'^k} U_s + \frac{\partial x^p}{\partial x'^k} \frac{\partial U_p}{\partial x^q} \frac{\partial x^q}{\partial x'^j} \quad (\text{A. 62})$$

Substituindo a equação (A. 59) no primeiro termo da equação (A. 62):

$$\begin{aligned} \frac{\partial U'_k}{\partial x'^j} &= \left( \frac{\partial x^s}{\partial x'^n} \Gamma'_{jk} - \frac{\partial x^i}{\partial x'^j} \frac{\partial x^p}{\partial x'^k} \Gamma'_{ip} \right) U_s + \frac{\partial x^p}{\partial x'^k} \frac{\partial U_p}{\partial x^q} \frac{\partial x^q}{\partial x'^j} \quad \Rightarrow \\ \frac{\partial U'_k}{\partial x'^j} &= \Gamma'_{jk} \underbrace{\frac{\partial x^s}{\partial x'^n} U_s}_{U'_n} - \frac{\partial x^q}{\partial x'^j} \frac{\partial x^p}{\partial x'^k} \Gamma'_{qp} U_s + \frac{\partial x^p}{\partial x'^k} \frac{\partial U_p}{\partial x^q} \frac{\partial x^q}{\partial x'^j} \quad \Rightarrow \\ \frac{\partial U'_k}{\partial x'^j} &= \Gamma'_{jk} U'_n - \frac{\partial x^q}{\partial x'^j} \frac{\partial x^p}{\partial x'^k} \Gamma'_{qp} U_s + \frac{\partial x^p}{\partial x'^k} \frac{\partial U_p}{\partial x^q} \frac{\partial x^q}{\partial x'^j} \quad \Rightarrow \\ \frac{\partial U'_k}{\partial x'^j} - U'_n \Gamma'_{kj} &= \frac{\partial x^p}{\partial x'^j} \frac{\partial x^q}{\partial x'^k} \left( \frac{\partial U_p}{\partial x^q} - U_s \Gamma'_{pq} \right) \quad (\text{A. 63}) \end{aligned}$$

Para que a equação (A. 63) seja semelhante com a equação (A. 7) deve-se ter,

$$U'_{k,j} = \frac{\partial U'_k}{\partial x'^j} - U'_n \Gamma'_{kj} \quad e \quad U_{p,q} = \frac{\partial U_p}{\partial x^q} - U_s \Gamma'_{pq} \quad (\text{A. 64})$$

Substituindo a equação (A. 64) na equação (A. 63) temos:

$$U'_{k,j} = \frac{\partial x^p}{\partial x'^k} \frac{\partial x^q}{\partial x'^j} U_{pq} \quad (\text{A. 65})$$

A equação (A.65) representa a lei de transformação do tensor de 2ª ordem e que a derivada covariante de um vetor covariante ( $U'_{k,j}$ ) resulta em um tensor covariante de 2ª ordem [56].

### A.10.2 Derivada covariante de um vetor contravariante

Seja  $U^i$  e  $U'^i$  as componentes do vetor contravariante em um sistema de coordenadas  $x^n$  e  $x'^n$  respectivamente. Logo:

$$U^s = \frac{\partial x^s}{\partial x'^k} U'^k \quad (\text{A.66})$$

Diferenciando parcialmente a equação (A.66) em relação  $x'^j$  obtemos:

$$\begin{aligned} \frac{\partial U^s}{\partial x'^j} &= \frac{\partial}{\partial x'^j} \left( \frac{\partial x^s}{\partial x'^k} U'^k \right) \Rightarrow \\ \frac{\partial U^s}{\partial x'^j} &= \frac{\partial^2 x^s}{\partial x'^j \partial x'^k} U'^k + \frac{\partial x^s}{\partial x'^k} \frac{\partial U'^k}{\partial x'^j} \end{aligned} \quad (\text{A.67})$$

Substituindo a equação (A.59) no primeiro termo da equação (A.67)

$$\begin{aligned} \frac{\partial U^s}{\partial x'^j} &= \left( \frac{\partial x^s}{\partial x'^m} \Gamma_{jk}^m - \frac{\partial x^i}{\partial x'^j} \frac{\partial x^p}{\partial x'^k} \Gamma_{ip}^s \right) U'^k + \frac{\partial x^s}{\partial x'^k} \frac{\partial U'^k}{\partial x'^j} \Rightarrow \\ \frac{\partial U^s}{\partial x'^j} &= \frac{\partial x^s}{\partial x'^m} \Gamma_{jk}^m U'^k - \frac{\partial x^i}{\partial x'^j} \frac{\partial x^p}{\partial x'^k} \Gamma_{ip}^s U'^k + \frac{\partial x^s}{\partial x'^k} \frac{\partial U'^k}{\partial x'^j} \Rightarrow \\ \frac{\partial U^s}{\partial U^i} \frac{\partial U^i}{\partial x'^j} &= \frac{\partial x^s}{\partial x'^m} \Gamma_{jk}^m U'^k - \frac{\partial x^i}{\partial x'^j} \frac{\partial x^p}{\partial x'^k} \Gamma_{ip}^s U'^k + \frac{\partial x^s}{\partial x'^k} \frac{\partial U'^k}{\partial x'^j} \Rightarrow \\ \frac{\partial U^s}{\partial U^i} \frac{\partial U^i}{\partial x'^j} &= \frac{\partial x^s}{\partial x'^m} \Gamma_{jk}^m U'^k - \underbrace{\frac{\partial x^p}{\partial x'^k} U'^k}_{U^p} \frac{\partial x^i}{\partial x'^j} \Gamma_{ip}^s + \frac{\partial x^s}{\partial x'^k} \frac{\partial U'^k}{\partial x'^j} \Rightarrow \end{aligned}$$



Permutando os índices  $n \Leftrightarrow k$  no primeiro termo do lado direito da equação anterior, obtemos:

$$\begin{aligned} \frac{\partial U^s}{\partial U^i} \frac{\partial U^i}{\partial x'^j} &= \frac{\partial x^s}{\partial x'^k} \Gamma'^k_{jn} U'^n - U^p \frac{\partial x^i}{\partial x'^j} \Gamma^s_{ip} + \frac{\partial x^s}{\partial x'^k} \frac{\partial U'^k}{\partial x'^j} && \Rightarrow \\ \frac{\partial U^s}{\partial U^i} \frac{\partial U^i}{\partial x'^j} + U^p \frac{\partial x^i}{\partial x'^j} \Gamma^s_{ip} &= \frac{\partial x^s}{\partial x'^k} \Gamma'^k_{jn} U'^n + \frac{\partial x^s}{\partial x'^k} \frac{\partial U'^k}{\partial x'^j} && \Rightarrow \\ \frac{\partial x^i}{\partial x'^j} \left( \frac{\partial U^s}{\partial U^i} + U^p \Gamma^s_{pi} \right) &= \frac{\partial x^s}{\partial x'^k} \left( \Gamma'^k_{nj} U'^n + \frac{\partial U'^k}{\partial x'^j} \right) && \Rightarrow \\ \frac{\partial U'^k}{\partial x'^j} + \Gamma'^k_{nj} U'^n &= \frac{\partial x'^k}{\partial x^s} \frac{\partial x^i}{\partial x'^j} \left( \frac{\partial U^s}{\partial U^i} + U^p \Gamma^s_{pi} \right) && (A.68) \end{aligned}$$

Para que a equação (A.68) seja semelhante com a equação (A.9) deve-se ter:

$$U'^k_{,j} = \frac{\partial U'^k}{\partial x'^j} + \Gamma'^k_{nj} U'^n \quad e \quad U^s_{,i} = \frac{\partial U^s}{\partial U^i} + U^p \Gamma^s_{pi} \quad (A.69)$$

Substituindo a equação (A.69) na equação (A.68):

$$U'^k_{,j} = \frac{\partial x'^k}{\partial x^s} \frac{\partial x^i}{\partial x'^j} U^s_{,i} \quad (A.70)$$

A equação (A.70) representa a lei de transformação do tensor misto de 2ª ordem e que a derivada covariante de um vetor contravariante ( $U'^k_{,j}$ ) resulta em um tensor misto de 2ª ordem [56].

## A.11 Tensor de curvatura ou de Riemann-Christoffel

Seja  $x^i = x(s)$  as equações paramétricas de uma curva em que  $s$  é o arco medido de um dado ponto, então o vetor  $u^i = \frac{dx^i}{ds}$  é um vetor unitário tangente à curva. Se a curva considerada é uma geodésica,  $Du^i = 0$  ao longo dessa curva, o vetor  $u^i$  é transportado paralelamente de um ponto  $x^i$  para outro ponto  $x^i + dx^i$  sobre a mesma geodésica com o vetor  $u^i + du^i$ . Consequentemente, no transporte paralelo ao longo de uma geodésica No espaço não euclidiano o transporte do vetor de um ponto a outro, fornece resultados diferentes se os caminhos seguidos são diferentes, logo o transporte paralelo de um vetor ao longo de um caminho fechado, esse vetor não mais coincidirá com o vetor inicial. A variação de um vetor  $U_a$  durante seu transporte paralelo ao longo de um caminho fechado tem que  $U_{a,ij} \neq U_{a,ji}$ , ou seja, quando tomamos duas vezes a derivada covariante de um vetor, o resultado da derivação depende, em geral da ordem da derivação [45].

Considere a derivada covariante de  $U_a$  em relação à  $x^i$ :

$$U_{a,i} = \frac{\partial U_a}{\partial x^i} - \Gamma_{a,i}^r U_r \quad (A.71)$$

Derivando covariantemente à equação (A.71) em relação à  $x^j$ :

$$\begin{aligned} U_{a,ij} &= \frac{\partial U_{a,i}}{\partial x^j} - \Gamma_{aj}^p U_{p,i} - \Gamma_{ij}^p U_{a,p} \quad \Rightarrow \\ U_{a,ij} &= \frac{\partial}{\partial x^j} \left( \frac{\partial U_a}{\partial x^i} - \Gamma_{ai}^r U_r \right) - \Gamma_{aj}^p \left( \frac{\partial U_p}{\partial x^i} - \Gamma_{pi}^q U_q \right) - \Gamma_{ij}^p \left( \frac{\partial U_a}{\partial x^p} - \Gamma_{ap}^s U_s \right) \quad \Rightarrow \\ U_{a,ij} &= \frac{\partial^2 U_a}{\partial x^j \partial x^i} - \frac{\partial \Gamma_{ai}^r}{\partial x^j} U_r - \Gamma_{ai}^r \frac{\partial U_r}{\partial x^j} - \Gamma_{aj}^p \frac{\partial U_p}{\partial x^i} + \Gamma_{aj}^p \Gamma_{pi}^q U_q - \Gamma_{ij}^p \frac{\partial U_a}{\partial x^p} \\ &\quad + \Gamma_{ij}^p \Gamma_{ap}^s U_s \end{aligned} \quad (A.72)$$

fazendo uma permuta de  $i \rightleftharpoons j$  temos:

$$U_{a,ji} = \frac{\partial^2 U_a}{\partial x^i \partial x^j} - \frac{\partial \Gamma_{aj}^r}{\partial x^i} U_r - \Gamma_{aj}^r \frac{\partial U_r}{\partial x^i} - \Gamma_{ai}^p \frac{\partial U_p}{\partial x^j} + \Gamma_{ai}^p \Gamma_{pj}^q U_q - \Gamma_{ji}^p \frac{\partial U_a}{\partial x^p} + \Gamma_{ji}^p \Gamma_{ap}^s U_s \quad (A.73)$$

e efetuando a diferença entre as equações (A.72) e (A.73) obtemos:

$$U_{a,ij} - U_{a,ji} = \underbrace{\left( \frac{\partial \Gamma_{aj}^r}{\partial x^i} - \frac{\partial \Gamma_{ai}^r}{\partial x^j} + \Gamma_{aj}^p \Gamma_{pi}^r - \Gamma_{ai}^p \Gamma_{pj}^r \right)}_{R_{aij}^r} U_r \quad (A.74)$$

A diferença entre  $U_{a,ij} - U_{a,ji}$  fica definida por um tensor de curvatura ou de Riemann-Christoffel de 4ª ordem  $R_{aij}^r$  e  $U_r$  é um vetor covariante arbitrário, logo [45]:

$$R_{aij}^r = \frac{\partial \Gamma_{aj}^r}{\partial x^i} - \frac{\partial \Gamma_{ai}^r}{\partial x^j} + \Gamma_{aj}^p \Gamma_{pi}^r - \Gamma_{ai}^p \Gamma_{pj}^r \quad (A.75)$$

No espaço euclidiano o tensor de curvatura é nulo e se passarmos para um sistema de coordenadas na qual o símbolo de Christoffel é nulo em todo espaço, o tensor curvatura também será nulo devido ao seu caráter tensorial. Se em um espaço não-euclidiano tivermos um dado ponto em coordenadas cartesianas o símbolo de Christoffel será nulo nesse ponto, mas o tensor de curvatura não será nulo para o mesmo ponto (isso é devido as derivadas dos símbolos de Christoffel não se anularem nesse ponto) [45].

Contraindo o tensor de curvatura apresentado na equação (A.75) obtemos:

$$R_{maij} = g_{mr} R_{aij}^r \quad (A.76)$$

que é tensor de curvatura da forma covariante. Agora contraindo o tensor de curvatura apresentado na equação (A.76), definiremos o tensor de Ricci [45], logo:

$$R_{aj} = g^{mi} R_{maij} = R_{amj}^m \quad (A.77)$$

onde a equação (A.75) é escrita da seguinte forma:

$$R_{aj} = \frac{\partial \Gamma_{aj}^r}{\partial x^r} - \frac{\partial \Gamma_{ar}^j}{\partial x^j} + \Gamma_{aj}^r \Gamma_{rp}^p - \Gamma_{ar}^p \Gamma_{jp}^r \quad (A.78)$$

Uma característica do tensor de Ricci é que ele é simétrico, ou seja:

$$R_{aj} = R_{ja} \quad (A.79)$$

Contraindo o tensor de Ricci apresentado na equação (A.77), obtemos o invariante, chamado curvatura escalar do espaço, ou seja, a curvatura é independente do sistema de coordenadas [45], sendo assim:

$$R = g^{aj} R_{aj} = g^{aj} g^{mi} R_{maj} \quad (A.80)$$

## REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- [1] B.F. de Oliveira, *Estudos numéricos da formação e dinâmica de defeitos topológicos em cristais líquidos nemáticos*, Tese de Doutorado, UFPB, João Pessoa, 2012.
- [2] M. A. M. Souza, D. Bazeia, L. Losano e R. Menezes. *Campos escalares reais e a quebra espontânea de simetria: Uma descrição analítica para defeitos topológicos*. Lat. Am. J. Phys. Educ. Vol. 6, No. 1, Março 2012
- [3] M. Simões and M. Pazetti, *EPL*, **92**, (2010) 14001.
- [4] M. Simões, A. de Campos, D. Barbato, *Phys. Rev.* **E 75**, 061710 (2007).
- [5] J. L. Ericksen, *Arch. Ration. Mech. Anal.* **4**, 231 (1960); **9**, 371 (1962).
- [6] F. M. Leslie, *Q. J. Mech. Appl. Math.* **19**, 357 (1966).
- [7] O. Parodi, *J. Phys. (Paris)* **31**, 581 (1970).
- [8] D. Baalss and S. Hess, *Phys. Rev. Let.* **57**, (1986).
- [9] D. Baalss and S. Hess, *Z. Naturforsch*, **43a**, 662 (1988).
- [10] H. Sollich, D. Baalss, S. Hess, *Mol. Cryst. Liq. Cryst.* 168 (1989).
- [11] H. Ehrentaut, S. Hess, *Phys. Rev. E*, **51**, 2203 (1995).
- [12] M. Doi and F. Edwards, *J.C.S.Faraday* **74**, 560 (1978); *J.C.S.Faraday* **74**, 918 (1978).
- [13] M. Doi, *J. Pol. Science* **19**, 229 (1981).
- [14] N. Kuzuu and M. Doi, *J. of Phys. Soc. of Japan* 52 3486 (1983). *J. of Phys. Soc. Of Japan* **53**, 1031 (1984).
- [15] M. Doi and S. F. Edwards, *The Theory of Polymer Dynamics*; Oxford Press, NewYork, 1986.
- [16] CAMPOS, A. de, *Aproximação de Conexão Afim para Constantes elásticas de cristais líquidos nemáticos*. Tese de Doutorado, Universidade Estadual de Londrina (2007).

- [17] Maurício Ferreira Rosa, Raquel de Oliveira Vilhena. *Revista Eletrônica de Farmácia*, ISSN 1808-0804 Vol. IX (1), 49 – 61, 2012.
- [18] F. Reinitzer, *Mh. Chem.*, 9, 421 (1888).
- [19] G. Friedel. Les états mésomorphes de la matière, *Annales de Physique* **18**, 273-474 (1922);
- [20] SILVA, A.I, *Estudo de um Fluido Complexo visando uma Aplicação Cosmológica*, Dissertação de Mestrado, DFI/UEM, Maringá, (2009).
- [21] C. W. Ossen. The theory of liquid crystals, *Transactions of the Faraday Society* **29**, 883-900 (1933);
- [22] H. Zocher. The effect of a magnetic field on the nematic state, *Transactions of the Faraday Society* **29**, 945-957 (1933);
- [23] T. J. Sluckin, D. A. Dunmur and H. Stegemeyer. *Crystal that flow - Classic papers from history of liquid crystals*, Taylor & Francis, (2004);
- [24] L. S. Ornstein, W. Kast. New arguments for the swarm theory of liquid crystals, *Transactions of the Faraday Society* **29**, 930-944 (1933);
- [25] W. Maier, A. Saupe. Eine einfache molekulare Theorie des nematischen kristallinflüssigen Zustandes, *Zeitschrift Naturforschung* **13a**, 564-566 (1958);
- [26] F. C. Frank. On the theory of liquid crystals, *Discussions of the Faraday Society* **25**, 19-28 (1958);
- [27] Sluckin, Tim, *Flúidos Fora da Lei - A história dos cristais Líquidos: de curiosidade a tecnologia*, IST PRESS, Lisboa, 2006 - cap.2.
- [28] P. G. de Gennes, J. Prost. *The Physics of Liquid Crystals*, 2nd edition, Clarendon Press, Oxford (1993);
- [29] C. Kittel. *Introduction to Solid State Physics*, 4<sup>th</sup> edition, Wiley, New York (1971).
- [30] P. J. Collings and M. Hird, *Introduction to Liquid Crystals*, Princeton University Press, USA (1990).
- [31] G. Vertogen and W. H. de Jeu, *Thermotropic Liquid Crystals, Fundamentals*, Springer-Verlag, Germany, 1988).
- [32] Kleman, Maurice, *Soft matter physics: an introduction*, Springer, Verlag New York, (2003) - cap.1 e cap.2.
- [33] P.A. Santoro, *Medidas de Índice de Refração em uma Fase Nemática Calamítica*, Dissertação de Mestrado, DFI/UEM, Maringá, 2002.

- [34] L.B, Gonçalves, *Indução de ordem nas Fases Isotrópicas de Cristais Líquidos Liotrópicos: uma investigação experimental*, Dissertação de Mestrado, DFI/UEM, Maringá, 2012.
- [35] B. J. Forrest and L. W. Reeves. *New lyotropic liquid crystals composed of finite nonspherical micelles*. *Chem. Rev.*, **81**(1):1–14, (1981).
- [36] Y. Hendrikx, J. Charvolin, M. Rawiso, L. Liébert, and M. C. Holmes. *Anisotropic aggregates of amphiphilic molecules in lyotropic nematic phases*. *J. Phys.Chem.*, **87**:3991–3999, (1983).
- [37] G.H. Brown and J.J. Wolken, *Liquid Crystals and Biological Structures* (Academic Press, N. York, 1979).
- [38] P.R.G. Fernandes, Patente Brasileira: *Sensor de Vibrações Mecânicas Utilizando Cristais Líquidos*, PI9805500-3/UEM (1998);
- [39] Lenart, V. M. *Estudo das propriedades ópticas não lineares de cristais líquidos luminescentes através da técnica de Z-scan*, Dissertação de Mestrado, UEPG, Paraná, 2010.
- [40] Domiciano, S. M, *Relações universais entre os coeficientes de miesowicz e estudo comparativo entre dados experimentais e previsões teóricas*, Tese de Doutorado, UEL, 2003.
- [41] S. Chandrasekhar, *Liquid Crystals*, Cambridge University, Cambridge, 2nd edition, 1977.
- [42] F. M. Leslie, *Arch Rational Mech. Anal.* **28**, 265 (1968)
- [43] E. Dubois-Violette et al, *Instabilities in Nematic Liquid Crystals*, *Solid State Physics*, suplement 14, 1978.
- [44] I. W. Stewart. *The Static and Dynamic Continuum Theory of Crystals*. Taylor and Francis, London, 2004.
- [45] L. Landau e E. Lifshitz, *Curso de Física Teórica*, Vol. 2: Teoria do Campo, Editora Mir, (1980);
- [46] ALVES, Fernando da Silva. *Tese de Doutorado*, Universidade Estadual de Londrina (2008).
- [47] G. Barbero and L. R. Evangelista. *Adsorption Phenomena and Anchoring Energy in Nematic Liquid Crystals*, Taylor & Francis, London (2006);

- [48] E.F. Gramsbergen, L. Longa, W.H. de Jeu, Phys. Rep., 135, no.4, 195-257(1986);
- [49] P. G. de Gennes, Mol. Cryst. Liq. Cryst. 12, 193 (1971).
- [50] W. H. de Jeu, Physical properties of liquid crystalline materials, Gordon and Breach, New York,1980.
- [51] Egbert F. Gramsbergen, Lech Longa and Wim H. de Jeu. Landau Theory of the Nematic-Isotropic Phase Transition. Physics Reports. 135, No 4. (1986) 195-257.
- [52] J. D. Jackson, *Classical Electrodynamics*, 2nd ed. Wiley, New York, 1985.
- [53] P. G. de Gennes and J. Prost, *The Physics of Liquid Crystals*, 2nd ed. Clarendon Press, Oxford, 1993
- [54] BARBATO, David Carlo Almeida, *Cálculo da elasticidade de cristais líquidos nemáticos através de métodos da geometria diferencial*. Dissertação de Mestrado, Universidade Estadual de Londrina (2007).
- [55] ANTONIO, F. J. *Estudo de Defeitos Topológicos em Cristais Líquidos do Ponto de Vista Cosmológico*, Dissertação de Mestrado, UEM, Maringá, 2009.
- [56] N. Islam, *Tensors and Their Applications*, Editora New Age International, (2006);
- [57] Toscano Couto, R., *Introdução aos Tensores*, Texto Didático PROAC/UFF, 2003.