



**UNIVERSIDADE FEDERAL DO VALE DO SÃO FRANCISCO  
PÓS-GRADUAÇÃO EM CIÊNCIA DOS MATERIAIS**

Cícero Thiago Gomes Dos Santos

**ESTUDO DA PROPAGAÇÃO DA LUZ EM CRISTAIS LÍQUIDOS  
NEMÁTICOS COM DEFEITOS POR MEIO DE GEOMETRIA  
DIFERENCIAL**

Juazeiro-BA  
2014



**CÍCERO THIAGO GOMES DOS SANTOS**

**ESTUDO DA PROPAGAÇÃO DA LUZ EM CRISTAIS LÍQUIDOS  
NEMÁTICOS COM DEFEITOS POR MEIO DE GEOMETRIA  
DIFERENCIAL**

Dissertação apresentada à  
Universidade Federal do Vale do São  
Francisco – UNIVASF, Campus  
Juazeiro, como requisito da obtenção  
do título de mestre em Ciência dos  
Materiais.

Orientador: Prof. Dr. Márcio Pazetti

Juazeiro – BA  
2014

	Santos, Cícero T. G. dos.
S237e	Estudo da Propagação da Luz em Cristais Líquidos Nemáticos com Defeitos por meio de Geometria Diferencial / Cícero Thiago Gomes dos Santos. -- Juazeiro, 2014. xi, 78 f.: il.; 29 cm.
	Dissertação (Mestrado em Ciência dos Materiais) - Universidade Federal do Vale do São Francisco, Campus Juazeiro, Juazeiro - BA, 2014.
	Orientador : Prof. Dr. Marcio Pazetti. Banca examinadora: Manuel Simões Filho, Wagner de Assis Cangussu Passos.
	1. Cristais líquidos nemáticos. 2. Propagação da luz. I. Título. II. Pazetti, Márcio. III. Universidade Federal do Vale do São Francisco.
	CDD 620.11

Ficha catalográfica elaborada pelo Sistema Integrado de Biblioteca SIBI/UNIVASF

PBGM

CIÊNCIA  
MATERIAIS

FUNDAÇÃO UNIVERSIDADE FEDERAL DO VALE DO SÃO FRANCISCO

Avenida Antônio Carlos Magalhães, 510 - Santo Antônio. CEP: 48902-300 Juazeiro/BA

Tel/Fax: (74)3614-1932, [www.univasf.edu.br/~cpgcm](http://www.univasf.edu.br/~cpgcm)

COLEGIADO DE PÓS-GRADUAÇÃO EM CIÊNCIA DOS MATERIAIS

## PARECER DA BANCA EXAMINADORA DE DEFESA DE DISSERTAÇÃO DE MESTRADO

Mestrando: Cícero Thiago Gomes dos Santos

Título da dissertação

Estudo da propagação da luz em cristais líquidos nemáticos com defeitos por meio de geometria diferencial

A banca examinadora, composta pelos professores Marcio Pazetti (Presidente e Orientador), Wagner de Assis Cangussu Passos, da Universidade Federal do Vale do São Francisco e Manuel Simões Filho, da Universidade Estadual de Londrina, consideram o candidato:

Aprovado

Reprovado

Secretaria do Colegiado de Pós-Graduação em Ciência dos Materiais da Universidade Federal do Vale do São Francisco ao vigésimo quinto dia do mês de junho de 2014.

  
Prof. Marcio Pazetti

  
Prof. Wagner de Assis C. Passos

  
Prof. Manuel Simões Filho

*Deixo à minha mão, pela força e  
e à memória do meu pai.*

*Dedico à minha mãe, pela força e  
compreensão, e à memória de meu pai.*

## **AGRADECIMENTOS**

Agradeço a Deus pelos dons e graças que me concedeu para sua maior honra e glória.

Agradeço à minha família pelo apoio e encorajamento.

Agradeço ao meu orientador, Márcio Pazetti, grande ser humano e excepcional físico teórico, que me guiou pacientemente nessa jornada.

Agradeço aos meus grandes amigos e colegas de profissão, Newton, Jaderson, Francisco Miguel e Ericleiton, pelas inúmeras vezes que me auxiliaram.

Agradeço aos mestrandos do CPGCM, em especial Francisco Matias, Jorge Maurício, Georganes Gil, Jorge Adriano, Ricardo Menezes, Amanda Alves, Geciane Alves, Ariadne Helena, Paulo Henrique, André Romão e Simone Araújo pelos momentos alegres e produtivos intelectualmente.

Agradeço à D. Zezé, Denise e Renata Saldanha por fazerem seus respectivos ofícios com amor e dedicação e sobretudo pelas lições de humildade e humanidade.

Agradeço aos meus professores de graduação Paulo Peixoto, Alberto Bertuola, Pedro Campos, Samuel Gomes, Aléssio Tony e Bruno Gomes pela excelente formação que me propiciaram.

Agradeço aos meus professores de pós-graduação Helinando de Oliveira, Wagner Passos, Télio Nobre e Nikifor Rakov pelas brilhantes aulas.

Agradeço ao Prof. Dr. Caio Sátiro da UFRPE pela ajuda na compreensão de seus artigos.

Agradeço à minha namorada Andressa Clemente pelo carinho, aconchego e apoio.

Agradeço aos vicentinos, Conferência Santa Terezinha, pelos momentos de edificação espiritual.

Enfim, agradeço sinceramente a todos que, de forma direta ou indireta, me ajudaram ao longo do caminho e que, com certeza, fazem parte dessa vitória.

“Liquid Crystals are beautiful and mysterious.  
I am fond of them for both reason.”  
Pierre Gilles De-Gennes

“*Non nobis, Domine, non nobis, sed nomine  
Tuo ad gloriam*”  
SI 115, 1

## RESUMO

Os cristais líquidos do tipo nemático apresentam diversos defeitos na configuração das suas moléculas, que fazem com que a luz seja desviada na proximidade dos mesmos. Um dos motivos da importância do estudo do comportamento da luz em tais estruturas reside na semelhança que os defeitos em nemáticos possuem com defeitos cosmológicos, permitindo que experimentos sejam realizados com o cristal líquido, a fim de estudar fenômenos cosmológicos inacessíveis. Para se obter as trajetórias da luz foi usada a métrica dos cristais líquidos nemáticos, obtida na literatura, e que foi calculada usando a generalização do princípio de Hess que afirma que as propriedades anisotrópicas dos cristais líquidos podem ser obtidas a partir da deformação das moléculas de líquidos ordinários. As equações diferenciais foram obtidas a partir da equação geodésica e suas soluções, as trajetórias de luz, foram plotadas juntamente com os seus defeitos. O comportamento da luz foi analisado levando-se em conta o tipo de defeito e os parâmetros microscópicos envolvidos.

.

**Palavras-chave:** Cristais Líquidos. Nemáticos. Defeitos.

## ABSTRACT

Nematic liquid crystals shows several defects in the configuration of their molecules that make the light to be deflected close them. One reason for the importance of this study lies in the similarity that defects in nematic have with cosmological defects, allowing experiments are performed with the liquid crystal in order to study inaccessible cosmological phenomena. To get the light paths was used the metric of the nematic liquid crystals, obtained in the literature. This metric was calculated using the generalization of Hess principle which states that the anisotropic properties of liquid crystals can be obtained from the deformation of the molecules of ordinary liquid. The differential equations were obtained from the geodesic equation and its solutions, the trajectories of light, were plotted along with its defects. The behavior of light was analyzed considering the defect type and the microscopic parameters involved.

**Key-words:** Liquid Crystals. Nematics. Defects.

## Lista de Figuras

Figura 1- Fases Mesomórficas.....	15
Figura 2- Representação esquemática da ordem molecular dos cristais líquidos. Disponível em < <a href="http://www.fsc.ufsc.br/~bechtold/LSA/Pesq/crist-liq/pesq-crt-liq.html">http://www.fsc.ufsc.br/~bechtold/LSA/Pesq/crist-liq/pesq-crt-liq.html</a> >. Acessado em 22/11/2012.....	17
Figura 3- Molécula Calamítica. Disponível em:< <a href="http://cftc.cii.fc.ul.pt/PRISMA/capitulos/capitulo3/modulo7/topico2.php">http://cftc.cii.fc.ul.pt/PRISMA/capitulos/capitulo3/modulo7/topico2.php</a> >Acessad o em 24/05/2012.....	18
Figura 4- Molécula Discótica. Disponível em: < <a href="http://cftc.cii.fc.ul.pt/PRISMA/capitulos/capitulo3/modulo7/topico2.php">http://cftc.cii.fc.ul.pt/PRISMA/capitulos/capitulo3/modulo7/topico2.php</a> > Acessado em: 24/05/2012.....	18
Figura 5-Fases Nemática, Esmética A e Esmética C. Disponível em: < <a href="http://grpfm.upc.edu/investigacion/cristales-liquidados#cl3">http://grpfm.upc.edu/investigacion/cristales-liquidados#cl3</a> > Acessado em: 31/05/2012.....	19
Figura 6 - Fase Colestérica. Disponível em < <a href="http://www.doitpoms.ac.uk/tlplib/anisotropy/liquidcrystals.php">http://www.doitpoms.ac.uk/tlplib/anisotropy/liquidcrystals.php</a> >Acessado em: 22/11/2012.....	20
Figura 7 - Representação de uma molécula anfifílica com formação de micela. Disponível em < <a href="http://www.fsc.ufsc.br/~bechtold/LSA/Pesq/crist-liq/pesq-crt-liq.html">http://www.fsc.ufsc.br/~bechtold/LSA/Pesq/crist-liq/pesq-crt-liq.html</a> > Acessado em 22/11/2012.....	21
Figura 8- Gráfico Parâmetro de Ordem vs Temperatura. Disponível em < <a href="http://web.media.mit.edu/~stefan/liquid-crystals/node2.html">http://web.media.mit.edu/~stefan/liquid-crystals/node2.html</a> >Acessado em 15/11/2012.....	23
Figura 9 - Representação de um vetor em eixos nãoortogonais. Disponível em< <a href="http://www.hfleming.com/tensor.pdf">http://www.hfleming.com/tensor.pdf</a> > Acessado em 15/11/2012.....	31
Figura 10 - Campo paralelo de vetores ao longo da curva C.....	47
Figura 11-Tipos de Deformações em Nemáticos.....	54
Figura 12 - Nemáticos em uma geometria confinada.....	56
Figura 13 - Textura Schlieren.....	57
Figura 14- Orientação do diretor ao redor de uma disclinação.....	59
Figura 15 - Orientação molecular na Vizinhança de uma disclinação.....	60
Figura 16 - Disclinações perpendiculares.....	61

Figura 17 - Configuração mais realística do diretor em uma disclinação.....	62
Figura 18- Relação entre a configuração do diretor e texturas Schlieren.....	62
Figura 19- Disclinações perpendiculares <sup>1</sup> .....	63
Figura 20–Trajetórias da luz para $k = -\frac{1}{2}$ e $c = 0$ .....	73
Figura 21 - Trajetórias da luz para $k = -1$ e $c = \pi/2$ .....	73
Figura 22 - Trajetórias da luz para $k = \frac{1}{2}$ e $c = \pi/4$ .....	74
Figura 23 - Trajetórias da luz para $k = -\frac{1}{2}$ e $c = \pi/4$ .....	74
Figura 24 - Trajetórias da luz para $k = 1$ e $c = \pi/2$ .....	74
Figura 25 - Trajetórias da luz para vários valores de excentricidade.....	75
Figura 26 - Trajetórias da luz para vários valores do parâmetro de ordem.....	76
Figura 27. Analogia entre a trajetória da luz em uma amostra nemática com defeito e em um campo gravitacional.....	77

## Sumário

Capítulo 1.....	12
INTRODUÇÃO.....	12
Capítulo 2.....	14
CRISTAIS LÍQUIDOS .....	14
2.1 Breve História dos Cristais Líquidos .....	14
2.2 Definição e Classificação.....	16
2.3 Diretor e Parâmetro de Ordem .....	21
Capítulo 3.....	24
ANÁLISE TENSORIAL .....	24
3.1 Introdução .....	24
3.2 Conceitos Preliminares .....	24
3.3 Transformação de Coordenadas.....	26
3.4 Vetores e Tensores Contravariantes. Invariantes .....	27
3.5 Vetores e Tensores Covariantes. Tensores Mistos .....	28
3.6 Interpretação Geométrica.....	30
3.7 Operações Fundamentais com Tensores.....	31
3.7.1 Adição e Subtração.....	31
3.7.2 Produto Externo.....	32
3.7.3 Contração .....	32
3.7.4 Produto Interno .....	33
3.7.5 Tensores Simétricos e Antissimétricos .....	33
3.7.6 Tensor Simétrico Conjugado (ou Recíproco).....	34
3.7.7 Lei do Quociente.....	34
3.8 O Tensor Métrico .....	35
3.8.1 A formação de novos tensores por meio dos tensores fundamentais .....	37
3.8.2 Magnitude de um vetor e ângulo entre vetores .....	38
3.9 A Equação da Geodésica.....	38
3.10 Símbolos de Christoffel e Derivada Covariante.....	41
3.11 Derivada intrínseca ou absoluta.....	46
3.12 Formas Tensoriais do Gradiente, Divergente, Rotacional e Laplaciano .....	49
Capítulo 4.....	52
DEFEITOS EM CRISTAIS LÍQUIDOS NEMÁTICOS .....	52
4.1 Teoria Elástica Contínua .....	52

4.2 Defeitos em Nemáticos.....	55
4.2.1 Disclinações .....	56
4.2.2 Defeito Pontual.....	63
Capítulo 5.....	64
A TRAJETÓRIA DA LUZ EM NEMÁTICOS COM DEFEITOS.....	64
5.1 A Propagação da Luz em Meios Anisotrópicos .....	64
5.2 A Métrica dos Cristais Líquidos Nemáticos .....	65
5.3 A Trajetória da Luz ao redor de Disclinações em Nemáticos.....	72
Capítulo 6.....	78
CONCLUSÕES PERSPECTIVAS .....	78
APÊNDICE A: Cálculo das Equações da Trajetória .....	79
APÊNDICE C: Solução da equação da energia livre de Frank.....	85
Bibliografia .....	87

## Capítulo 1

### INTRODUÇÃO

Há substâncias que não possuem uma única transição entre as fases sólida e líquida, apresentando, simultaneamente, propriedades que são características específicas de ambas as fases citadas. Essa fase é denominada cristal líquido (CL) e grande número de substâncias, geralmente orgânicas, apresentam tal comportamento. Uma das fases cristal líquido é chamada nemática (N) e é caracterizada por suas moléculas apresentarem ordem orientacional mas não posicional

Os cristais líquidos possuem uma diversa gama de aplicações tecnológicas (displays para relógios e computadores, janelas inteligentes, termômetros, cosméticos só para citar algumas), principalmente por suas propriedades ópticas<sup>2; 3; 4; 5</sup>. Além disso, podem ser utilizados também como laboratório para estudos da Gravitação e da Cosmologia, pela semelhança entre seus defeitos com defeitos cosmológicos<sup>6; 7; 8; 9</sup>.

Já em 1911, o físico francês Charles V. Mauguin discutiu a possibilidade de se propagar luz através da estrutura helicoidal de um nemático torcido colocado entre duas lâminas de vidro com ranhuras perpendiculares entre si, quando vistas de uma das lâminas<sup>10</sup>. Ele percebeu que, em geral, luz incidente linearmente polarizada saía da amostra elipticamente polarizada. Esse é o princípio básico de funcionamento dos *displays* de cristais líquidos (LCD's). Estudos de óptica geométrica em CL nemáticos confinados em placas paralelas foram realizados por Kosmopoulos e Zenginoglu<sup>11; 12</sup>. Joets e Ribotta<sup>13</sup> consideraram o problema da propagação de raios em meios anisotrópicos e aplicaram aos nemáticos, assumindo que os raios são geodésicas. Sátiro e Moraes<sup>14; 15</sup> estenderam o estudo anterior para o caso de nemáticos com defeitos de linha (disclinações).

Por outro lado, Hess e colaboradores<sup>16</sup> propuseram que as propriedades anisotrópicas de um cristal líquido podem ser obtidas deformando o potencial de moléculas esféricas para que assumam a forma de moléculas elipsoidais. Recentemente, Simões, Campos e Barbato<sup>17</sup> generalizaram tal aproximação para que fosse tomada como dependente da posição e, no processo,

obtiveram uma métrica induzida pela anisotropia elipsoidal. Posteriormente mostrou-se que há uma analogia entre essa teoria com a teoria da relatividade geral e que a geometria do campo gravitacional pode ser simulada em uma amostra nemática<sup>9</sup>.

Neste trabalho, foi estudado como a luz se propaga em um meio não homogêneo – cristal líquido nemático – utilizando a aproximação geométrica para os raios de luz, de maneira análoga ao encontrado em <sup>14; 15</sup>. Porém, já parte-se de uma métrica efetiva dos nemáticos<sup>17</sup>, que leva em conta suas propriedades microscópicas. O uso dessa métrica traz vantagens quanto ao poder de manipulação da trajetória da luz pela variação de parâmetros microscópicos, além de reafirmar a validade de tal métrica para os nemáticos. Também fornece uma Teoria Geral dos Nemáticos para estudos semelhantes, não sendo necessário calcular uma nova métrica efetiva para cada defeito encontrado como aconteceu nos trabalhos anteriores.

Esta dissertação foi assim organizada: primeiramente, no cap. 2, e visando um conhecimento em traços gerais do objeto de estudo, serão apresentadas as classificações e características dos cristais líquidos, dando-se ênfase aos nemáticos.

No cap. 3 é fornecida uma detalhada apresentação do Cálculo Tensorial, com a intenção de familiarizar o leitor com os conceitos posteriormente trabalhados: o que são tensores covariantes e contravariantes, o que é métrica, o que é a equação da geodésica etc.

O cap. 4 é dedicado à teoria Elástica do Contínuo, em que são estudados os tipos de defeitos em nemáticos, dando-se especial atenção àqueles que serão utilizados para o estudo. É um capítulo de fundamental importância para o trabalho, uma vez que é sobre essa estrutura de defeitos que será estudada o comportamento dos raios de luz.

No cap. 5 são apresentados os desenvolvimentos das equações da trajetória e, a partir delas, os gráficos obtidos. É nesse capítulo, também, que é apresentada, brevemente, a métrica de Simões.

O último capítulo expõe as conclusões e perspectivas do trabalho. Um Apêndice foi incluído para detalhar os passos no desenvolvimento e resolução das equações e plotes de gráficos, bem como outros desenvolvimentos que aparecem ao longo do texto.

## Capítulo 2

### CRISTAIS LÍQUIDOS

Este capítulo faz uma retrospectiva histórica concisa dos principais desenvolvimentos teóricos acerca dos cristais líquidos. Apresenta a definição de cristal líquido e classificação das mesofases líquido-cristalinas, dando especial atenção à fase nemática. Introduce também, dois importantes conceitos referentes a essa mesofase: o parâmetro de ordem escalar e o diretor.

#### 2.1 Breve História dos Cristais Líquidos

Em 1888, o botânico austríaco Friedrich Reinitzer, estudando um tipo de colesterol retirado de plantas (conhecido atualmente como *benzoato de colesterila*), percebeu que essa substância sofria duas transições entre a fase sólida e a líquida. À temperatura de 148,5 °C, a substância tornava-se um líquido turvo, e à 178,5 °C, tornava-se um líquido transparente<sup>18</sup>. Ele reportou o fato para o físico alemão Otto Lehmann, o qual estudou a substância usando um microscópio equipado com um polarizador. Lehmann percebeu que o fluido turvo era um líquido homogêneo, mas na presença de luz polarizada se comportava como um cristal<sup>19</sup>. Foi ele que cunhou o termo “cristal líquido”, justamente por achar que fosse um cristal que fluía.

Seguidamente, o químico alemão Daniel Vorländer, após estudar as características moleculares da substância, concluiu que a fase cristal líquido era mais provável ocorrer em substâncias com moléculas lineares, i.e., moléculas com elevada anisotropia na forma<sup>20</sup>. Isso explica por que a água (nas CNTs), por exemplo, não possui uma fase líquido-cristalina: sua molécula com dois hidrogênios e um oxigênio pode ser aproximada a uma esfera. Esta descrição das moléculas como tendo uma forma de “bastões”, juntamente com descrições mais avançadas das formas das moléculas, ainda são utilizadas hoje para modelar muitas fases de cristal líquido.

Após a Primeira Guerra Mundial, pode-se dizer que foi a fase heroica no desenvolvimento das ideias sobre os cristais líquidos. Muito embora um grande

número de substâncias que exibiam comportamento líquido-cristalino tenha sido catalogada e muitas de suas propriedades tenham sido estudadas, ainda não havia uma teoria geral que explicasse o seu comportamento, nem uma classificação que divisasse os diferentes tipos de comportamento. Dois trabalhos, o de Max Born (1916) e François Grandjean (1917), foram um primeiro esforço nessa direção. Porém, a guerra não permitiu que eles penetrassem na linha de frente de pesquisa dos cristais líquidos, pois a produção científica nessa época foi temporária e parcialmente interrompida<sup>21</sup>.

Em 1922, George Friedel introduziu o termo “*materiais mesomórficos*” para designar os materiais que apresentavam fase líquido-cristalina, i.e., propriedades entre os líquidos e os sólidos<sup>22</sup>. Ele também introduziu as classificações dos cristais líquidos como *nemáticos*, *esméticos* e *colestéricos* (Fig. 1).

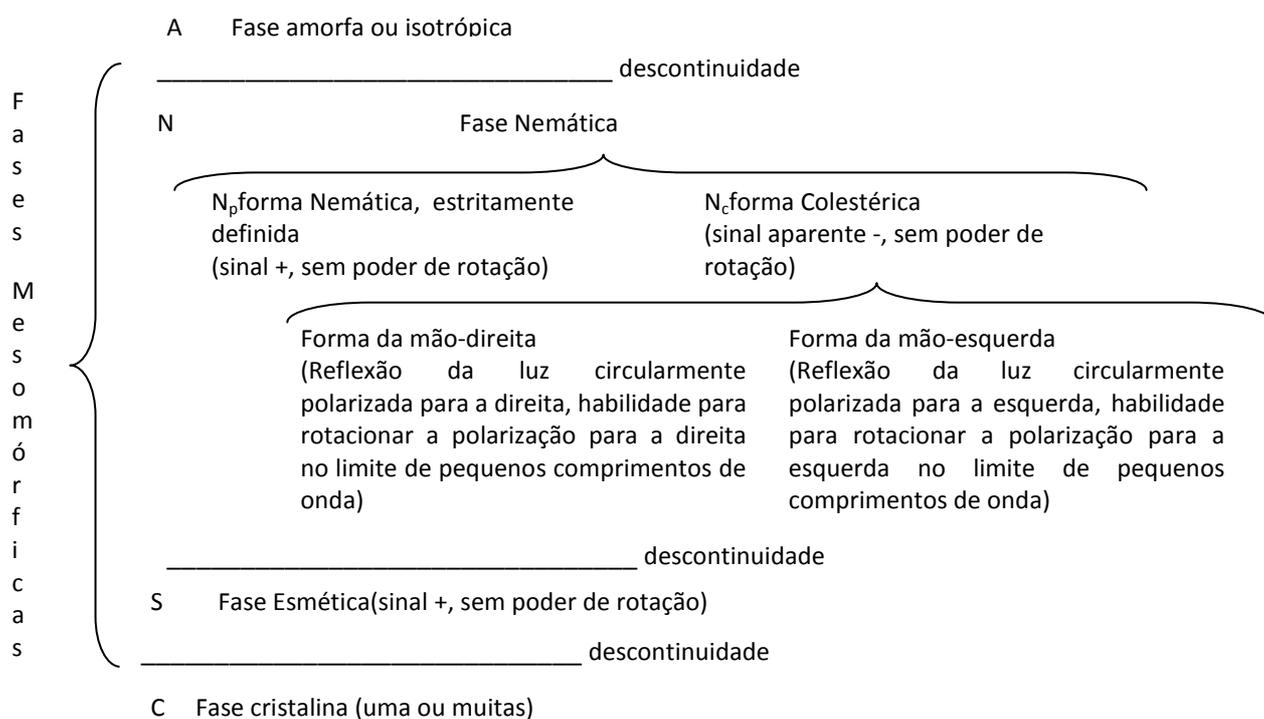


Figura 1. Esquema adaptado feito por Friedel<sup>22</sup>, apresentando sua classificação e as respectivas características de cada fase. A temperatura decresce de A para C.

Nos anos 1930s, Carl Oseen e Zöcher desenvolveram as bases de uma teoria estática para um modelo contínuo do estado nemático, que permitia explicar, entre outras, as singularidades (disclinações) observadas nos nemáticos<sup>23;24</sup>. Posteriormente, F. C. Frank reexaminou e apresentou a teoria de Oseen como uma teoria elástica de curvatura, em que introduz as chamadas ‘constantes de Frank’ e

chama a atenção para o que cada uma descreve: distorções ou curvaturas, que ele chamou de 'splay', 'bend' e 'twist' <sup>25</sup>. Finalmente, a formulação geral das leis de conservação e equações constitutivas, descrevendo o comportamento mecânico da mesofase nemática, foi devido a Ericksen<sup>26; 27</sup> e Leslie<sup>28</sup>.

O parâmetro de ordem escalar  $S = \frac{1}{2} \langle \cos^2 \theta - 1 \rangle$ , foi introduzido por Tsvetkov, em 1942; nessa expressão,  $\theta$  representa o ângulo entre a molécula e o eixo óptico, e os parênteses representam uma média sobre todas as moléculas<sup>29</sup>. Esse trabalho representa um primeiro passo na direção de uma teoria molecular do comportamento nemático, pois estabelece uma expressão matemática para o grau de ordem molecular dos cristais líquidos.

Wilhelm Maier e Alfred Saupe, em 1961, formulam pela primeira vez<sup>1</sup> uma teoria microscópica estatística relacionando a ordem orientacional de longo alcance com as propriedades da fase nemática<sup>30; 31; 32</sup>. Esta é uma teoria de campo médio, análoga à introduzida por Weiss para o estudo do ferromagnetismo. Neste modelo supõe-se que o efeito do ambiente anisotrópico sobre uma molécula pode ser representado por um campo de orientação média, do qual resulta um pseudopotencial<sup>33</sup>.

Pierre G. de Gennes propôs uma descrição fenomenológica dos efeitos que ocorrem próximo à temperatura de transição nemático-isotrópico, com base na teoria de Landau de transição de fase que ficou conhecida como Teoria Landau-de Gennes<sup>34</sup>. Em 1991, ele ganhou o Prêmio Nobel de Física, "por descobrir que os métodos desenvolvidos para estudar fenômenos de ordem em sistemas simples podem ser generalizados a formas mais complexas de matéria, em particular aos cristais líquidos e polímeros"<sup>35</sup>.

## 2.2 Definição e Classificação

Os cristais líquidos (CL's) são uma fase da matéria que é intermediária entre a fase sólida cristalina e a líquida isotrópica. Possuem propriedades de um líquido, como fluidez e incapacidade de suportar cisalhamento, mas também possuem

---

<sup>1</sup>Uma teoria molecular de campo do estado nemático foi proposta, em 1916, por Max Born, considerando o meio como um conjunto de dipolos elétricos permanentes e demonstrando a possibilidade de uma transição de uma fase isotrópica para uma anisotrópica quando a temperatura é diminuída. Porém, essa teoria não foi aceita, pois não é necessário dipolos permanentes para a ocorrência da fase líquido cristalina.

propriedades típicas de um sólido, como anisotropia em suas propriedades ópticas, elétricas e magnéticas e certa ordem orientacional (Fig. 2).

Os tipos de CL's que são observados dependem fortemente da estrutura de suas moléculas ou grupos moleculares: as moléculas devem ser altamente anisotrópicas na sua forma. Por isso, são encontrados necessariamente em compostos orgânicos, que permitem estruturas “alongadas” ou “achatadas”<sup>36</sup>.

Os CL's são classificados em mesofases, segundo seu grau de ordenamento e simetria. Assim, as mesofases são caracterizadas pelos graus de liberdade que as moléculas de CL apresentam, através das simetrias de translação e rotação. Portanto, as transições de fase ocorrem pela quebra na ordem posicional e/ou orientacional das moléculas.

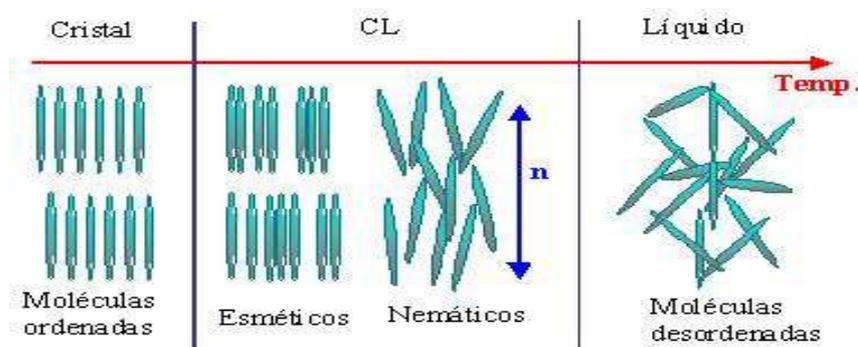


Figura 2. Representação esquemática da ordem molecular dos cristais líquidos em comparação com um sólido cristalino e um líquido isotrópico. A temperatura aumenta o grau de desordem

Quanto à maneira que sofrem transição de fase, podem ser divididos em dois grandes grupos: os *termotrópicos* e os *liotrópicos*. Os primeiros apenas sofrem transição de fase por variação da temperatura. Já os últimos, o fazem também por variação na concentração de seus componentes.

A grande maioria dos cristais líquidos termotrópicos são compostos por moléculas com forma de “bastão” (i.e., um eixo é muito maior que os outros dois), denominados *calamíticos* (Fig. 3). São observadas nas fases nemática, esmética e colestérica. Há também mesofases formadas por moléculas com forma de “disco”, chamadas de *discóticas* (Fig. 4), observadas nas fases colunares<sup>1; 37</sup>.

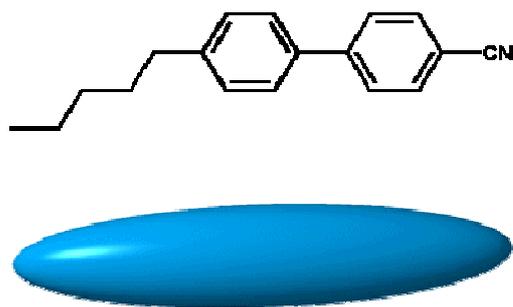


Figura 3. Molécula orgânica linear aproximada para um elipsoide, ou forma de “bastão”. Dimensões típicas são 20 Å x 5 Å. Moléculas deste tipo são chamadas calamíticas.

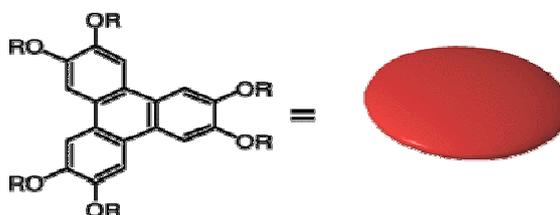


Figura 4. Molécula orgânica não linear aproximada para um disco, ou forma de plaqueta. Moléculas desse tipo são chamadas discóticas.

A fase nemática (N) é caracterizada por ter um alto grau de ordem orientacional de longo alcance, i.e., o eixo maior das moléculas tende a se alinhar a uma direção preferencial. Porém, não apresentam grau de ordem posicional de longo alcance. A direção preferencial geralmente varia de ponto a ponto no meio. Essa direção preferencial é descrita por um vetor unitário chamado diretor (Seção 2.3). O campo diretor é facilmente distorcido e pode ser alinhado a campos elétricos, magnéticos e por superfícies. Quando colocadas entre placas de vidro e vistas com microscópio ótico, observam-se regiões escuras, como “feixes”, que se encontram em alguns pontos. Essas estruturas são defeitos denominados *disclinações* (Seção 4.2). Os nemáticos termotrópicos possuem fluidez, são opticamente uniaxiais e fortemente birrefringente<sup>1</sup>. Neste estudo, esta mesofase é a que será utilizada, devido a sua simplicidade.

Alguns compostos que apresentam a fase nemática são o PAA, o MBBA e o 5CB. O primeiro cristal líquido nemático, o p-azoxyanisole (PAA), foi sintetizado por Gattermann e Ritschke<sup>38</sup>, e resultados reportados em 1890: foi o primeiro cristal

líquido baseado em uma substância que não ocorria naturalmente. Já o primeiro cristal líquido nemático relativamente estável à temperatura ambiente, o 4-methoxybenzilidene-4-butylaniline (MBBA), foi sintetizado por Kelker e Scheurle<sup>39</sup>, em 1969. Mas por várias razões, não foi considerado adequado para algumas aplicações. Um exemplo de um material que apresenta fase nemática estável à temperatura ambiente é o 4-pentyl-4cianobifenil (5CB) foi sintetizado por Gray e colaboradores<sup>40</sup>. É usada em displays como nemáticos “torcidos”<sup>41</sup>.

A fase esmética é caracterizada por uma estratificação, i.e., por uma estrutura em camadas. Desse modo, esta mesofase possui uma ordem posicional de longo alcance em uma dimensão. Essas camadas podem ter os mais variados arranjos. No esmético A ( $S_A$ ), por exemplo, as camadas estão alinhadas na vertical em cada camada. Já no esmético C ( $S_C$ ), cada camada está inclinada em relação à vertical (Fig. 5). Alguns ( $S_B$ ,  $S_E$ ,  $S_G$ ,  $S_H$  e outros) possuem ordem posicional de longo alcance tridimensional, embora com fraca interação entre as camadas. Também possui fluidez, sendo mais viscosa que a fase nemática<sup>1</sup>. A fase nemática sempre ocorre a temperaturas mais altas que a fase esmética<sup>36</sup>.

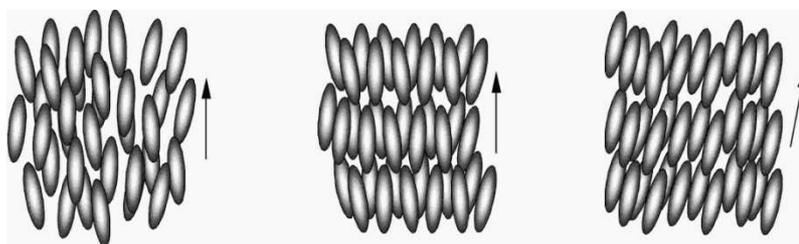


Figura 5. Representação das fases Nemática, Esmética A e Esmética C, respectivamente.

A fase colestérica (ou nemática quiral), assim como a nemática, possui ordem orientacional mas não posicional de longo alcance. A diferença é que a direção de alinhamento das moléculas varia de uma maneira regular através do meio. Em qualquer plano perpendicular ao eixo da torção o eixo maior das moléculas tende a se alinhar em uma única direção preferencial. Porém, em uma série de planos paralelos equidistantes, a direção preferencial rotaciona por um ângulo fixo. A distância medida ao longo do eixo de torção, em torno do qual a direção preferencial



tantas mesofases, não as discutiremos detalhadamente como fizemos com os termotrópicos. A ideia é dar apenas uma visão geral sobre os liotrópicos.

Os CL's liotrópicos são frequentemente encontrados em nossa vida diária. Por exemplo, eles ocorrem durante a dissolução do sabão e de detergentes. Os produtos da atividade metabólica como bile, urina e também o sangue, contém substâncias na fase liquido cristalina liotrópica<sup>37</sup>.

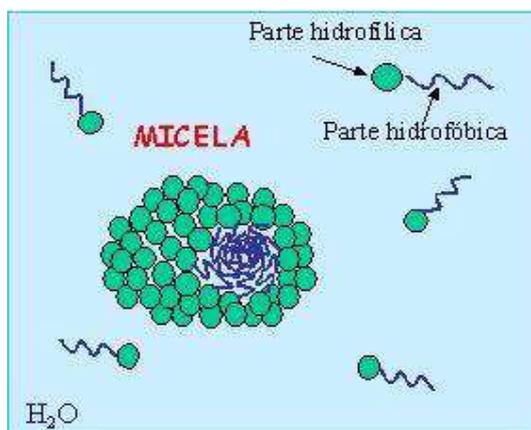


Figura 7. Esquema ilustrativo de CL's liotrópicos: moléculas anfifílicas formando uma micela.

### 2.3 Diretor e Parâmetro de Ordem

Uma das características das moléculas na fase cristal líquido é a ordem orientacional de longo alcance. No entanto, a direção preferencial de orientação varia de ponto a ponto no meio. Localmente, as moléculas flutuam em torno de uma direção preferida e, para representá-la, é introduzido um vetor adimensional. Este vetor é chamado *diretor* e é denotado por  $\mathbf{n}$ . Então, o diretor é um vetor que está sempre alinhado à direção de orientação *local* média das moléculas.

Por simplicidade, é tomada a unidade para o seu módulo. Esta invariância da magnitude do diretor implica que as forças externas e campos responsáveis por deformações elásticas, fluxo viscoso etc., são muito mais fracas que as interações moleculares<sup>1</sup>. Os estados do diretor  $\mathbf{n}$  e  $-\mathbf{n}$  são indistinguíveis. Isto significa que se for feito uma rotação de 180° no diretor, todas as propriedades físicas dos cristais líquidos nemáticos serão conservadas. Forças externas e campos agindo sobre o cristal líquido pode resultar em um movimento orientacional do diretor.

É preciso introduzir, também, um parâmetro que mesure o grau de ordenação das moléculas nesta mesofase, uma vez que a fase sólida apresenta um alto grau de ordenamento e a fase líquida não apresenta nenhum. Portanto, esse parâmetro deve ser nulo na fase isotrópica e não nulo na fase cristal líquido. Porém, isso não define um parâmetro de ordem de uma única maneira. Em muitos casos a escolha é feita de uma maneira natural. Por exemplo, para materiais ferromagnéticos, o parâmetro de ordem é a magnetização, que é a densidade de momentos magnéticos médios. A anisotropia em algumas propriedades dos cristais líquidos pode ser usada para se definir um parâmetro de ordem.

Os cristais líquidos nemáticos (CLN) são usualmente não ferroelétricos, i.e., na ausência de um campo elétrico externo a polarização é nula. Indicando por  $\mathbf{a}$  o eixo molecular maior de cada molécula,  $\mathbf{n}$  é uma média estatística das direções de  $\mathbf{a}$ . E uma vez que as direções  $\mathbf{n}$  e  $-\mathbf{n}$  são completamente equivalentes, os materiais nemáticos são tais que:

$$\langle \mathbf{n} \cdot \mathbf{a} \rangle = \langle \cos \theta \rangle = 0 \quad (2.1)$$

Em que  $\langle \dots \rangle$  representam uma média sobre todas as moléculas e  $\theta$ , o ângulo entre  $\mathbf{n}$  e  $\mathbf{a}$ . Naturalmente, a quantidade  $\langle (\mathbf{n} \cdot \mathbf{a})^2 \rangle \neq 0$  e pode ser usado para definir um parâmetro de ordem, caracterizando a dispersão de  $\mathbf{a}$  em torno de  $\mathbf{n}$ . A quantidade

$$S = \frac{3}{2} \left[ \langle (\mathbf{n} \cdot \mathbf{a})^2 \rangle - \frac{1}{3} \right] \quad (2.2)$$

É chamada *parâmetro de ordem escalar*. Na fase isotrópica, em que  $\langle (\mathbf{n} \cdot \mathbf{a})^2 \rangle = 1/3$ ,  $S = 0$ . Na fase CLN perfeita, em que  $\mathbf{n} = \mathbf{a}$ ,  $S = 1$ <sup>44</sup>. Assim, a quantidade  $S$  definida acima pode ser utilizada para descrever o grau de ordem dos CLN's, sendo que, para esta última, tem-se que  $0 < S < 1$ .

O parâmetro de ordem escalar é dependente da temperatura (Fig. 8). Há na literatura algumas proposições que descrevem analiticamente essa dependência, como a aproximação de Maier-Saupe<sup>32</sup>, a aproximação de Haller<sup>45</sup> e, recentemente, uma generalização da aproximação anterior, proposta por Chirtoc *et al*<sup>46</sup>. A aproximação de Haller é dada por

$$S = \left( 1 - \frac{T}{T^*} \right)^\beta$$

Em que  $\beta$  é um parâmetro que depende do material e  $T^*$  é a temperatura de transição nemático-isotrópico (NI). Ela é válida para temperaturas que não estão muito próximas de  $T^*$ .

É possível também introduzir um tensor de simetria quadrupolar, contendo todos os elementos de simetria da fase CLN. Esta quantidade é conhecida como *parâmetro de ordem tensorial*, e é definido por<sup>47</sup>:

$$Q_{ij} = \frac{3}{2}S(n_i n_j - \delta_{ij}) \quad (2.3)$$

Em que  $n_i$  e  $n_j$  são as componentes do diretor e  $\delta_{ij}$  é o delta de Kronecker (Ver Capítulo 3). Esse tensor é simétrico e possui traço nulo<sup>37</sup>.

É importante ressaltar que os parâmetros acima definidos são válidos para os CLN's, uniaxiais, por que essa será a fase estudada. Expressões mais gerais para o parâmetro de ordem tensorial podem ser encontradas em<sup>36; 37</sup>.

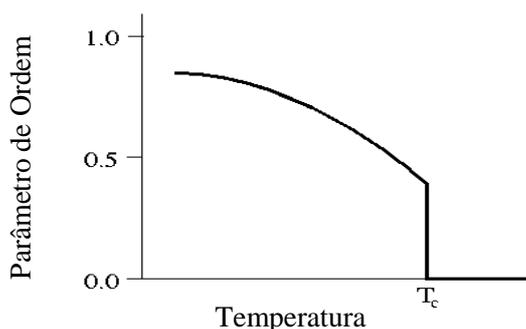


Figura 8. Gráfico qualitativo para um cristal líquido típico.  $T_C$  é a temperatura de transição cristal líquido-isotrópico.

## Capítulo 3

### ANÁLISE TENSORIAL

Este capítulo se destina à introdução do estudo dos aspectos elementares da Análise Tensorial dando especial atenção ao conceito de métrica e à equação da geodésica que serão utilizados nos próximos capítulos. O estudo aqui apresentado é muito semelhante ao encontrado em <sup>48; 49; 50; 51</sup>.

#### 3.1 Introdução

Tensores foram introduzidos pelo professor Gregório Ricci da Universidade de Pádua, Itália, em 1887, originalmente como uma extensão dos vetores. Uma quantidade que tem apenas magnitude é chamada *escalar* (possui apenas  $3^0 = 1$  componente) e uma quantidade com magnitude e direção é chamada *vetor* (possui  $3^1 = 3$  componentes). Porém, certas quantidades estão associadas a duas ou mais direções, tais quantidades são chamadas *tensores* ( $3^n$  componentes). Um exemplo clássico é o tensor de *stress* (ou tensão). Ele é uma medida da força média por unidade de área de uma superfície. Porém, a quantidade de “saída” (o tensor de *stress*) possui duas direções possíveis: a normal e a tangencial; os vetores ordinários não conseguem descrever satisfatoriamente essa situação. O tensor de *stress* foi o primeiro tensor a ser descrito e usado por cientistas e engenheiros. A palavra *tensor* deriva do Latim *tensus*, significando tensão ou estresse. Pode-se definir e investigar escalares, vetores e tensores quando eles são sujeitos a várias transformações de coordenadas. Verifica-se que tensores têm certas propriedades as quais são independentes do sistema de coordenadas usado para representar o tensor. Por esse motivo, os tensores são largamente utilizados em Mecânica, Elasticidade, Relatividade Geral, Eletromagnetismo e muitas outras disciplinas em Ciência e Engenharia.

#### 3.2 Conceitos Preliminares

No espaço tridimensional retangular, as coordenadas de um ponto são  $(x, y, z)$ . É conveniente escrever  $(x^1, x^2, x^3)$  para  $(x, y, z)$ . Em geral, as coordenadas de um

ponto num espaço  $n$ -dimensional são dadas por  $(x^1, x^2, x^3, \dots, x^n)$  tal que o espaço é denotado por  $V_n$ .

Considere a soma da série

$$S = a_1x^1 + a_2x^2 + \dots + a_nx^n = \sum_{i=1}^n a_ix^i \quad (3.1)$$

Usando a convenção da soma retiramos o sinal sigma e escrevemos como

$$\sum_{i=1}^n a_ix^i = a_ix^i \quad (3.2)$$

Isto é chamado *Convenção de Einstein da soma*: “Se um índice ocorre duas vezes em um termo, uma vez na posição inferior e outra na posição superior, então isto implica uma soma sobre este índice num intervalo definido”. Se o intervalo não é dado então assume-se que é de 1 a  $n$ .

Qualquer índice que está repetido em um dado termo é chamado *índice mudo*. Ex.: Considere a expressão  $a_ix^i$  em que  $i$  é o índice mudo. Então,

$$a_ix^i = a_1x^1 + a_2x^2 + \dots + a_nx^n \quad (3.3)$$

e

$$a_jx^j = a_1x^1 + a_2x^2 + \dots + a_nx^n \quad (3.4)$$

Estas duas equações provam que

$$a_jx^j = a_ix^i \quad (3.5)$$

Portanto, qualquer índice mudo pode ser trocado por outro com o mesmo intervalo.

Qualquer índice que aparece apenas uma vez em um dado termo é chamado *índice livre*. Ex.: Na expressão  $a_i^jx^i$ ,  $j$  é o índice livre.

O símbolo  $\delta_j^i$ , chamado Delta de Kronecker, é definido por

$$\delta_j^i = \begin{cases} 1, & \text{se } i = j \\ 0, & \text{se } i \neq j \end{cases} \quad (3.6)$$

Analogamente,  $\delta_{ij}$  e  $\delta^{ij}$  são definidos como:

$$\delta_{ij} = \begin{cases} 1, & \text{se } i = j \\ 0, & \text{se } i \neq j \end{cases} \quad (3.7)$$

$$\delta^{ij} = \begin{cases} 1, & \text{se } i = j \\ 0, & \text{se } i \neq j \end{cases} \quad (3.8)$$

O delta de Kronecker possui as seguintes propriedades:

i. Se  $x^1, x^2, \dots, x^n$  são coordenadas independentes, então

$$\frac{\partial x^i}{\partial x^j} = \delta_j^i \quad (3.9)$$

Também podemos escrever

$$\frac{\partial x^i}{\partial x^k} \frac{\partial x^k}{\partial x^j} = \delta_j^i \quad (3.10)$$

$$\text{ii. } \delta_i^i = \delta_1^1 + \delta_2^2 + \dots + \delta_n^n = 1 + 1 + \dots + 1 \rightarrow \delta_i^i = n \quad (3.11)$$

$$\text{iii. } a^{ij} \delta_k^j = a^{ik} \quad (3.12)$$

Em geral

$$a^{ij} \delta_k^j = a^{i1} \delta_k^1 + a^{i2} \delta_k^2 + \dots + a^{ik} \delta_k^k + \dots + a^{in} \delta_k^n$$

$$a^{ij} \delta_k^j = a^{ik} \text{ (pois } \delta_k^1 = \delta_k^2 = \dots = \delta_k^n = 0 \text{ e } \delta_k^k = 1 \text{)}$$

$$\text{iv. } \delta_j^i \delta_k^j = \delta_k^i \quad (3.13)$$

### 3.3 Transformação de Coordenadas

No espaço tridimensional retangular, as coordenadas de um ponto são  $(x^1, x^2, x^3)$  em que  $x^1, x^2$  e  $x^3$  são números reais. Denotaremos essas coordenadas simplesmente por  $x^i$ , em que  $i = 1, 2, 3$ . Similarmente, em um espaço  $n$ -dimensional, as coordenadas de um ponto são  $n$  variáveis independentes  $(x^1, x^2, \dots, x^n)$  em um sistema de coordenadas  $X$ . Seja  $(\bar{x}^1, \bar{x}^2, \dots, \bar{x}^n)$  as coordenadas do mesmo ponto no sistema  $Y$ .

Seja  $\bar{x}^1, \bar{x}^2, \dots, \bar{x}^n$  funções independentes unicamente definidas de  $x^1, x^2, \dots, x^n$ , então temos que

$$\bar{x}^i = \bar{x}^i(x^1, x^2, \dots, x^n); \quad i = 1, 2, 3, \dots, n \quad (3.14)$$

Como foi suposto que as funções são independentes e unicamente avaliadas, o *jacobiano* da transformação é não nulo:

$$J \begin{pmatrix} \bar{x}^i \\ x^i \end{pmatrix} = \left| \frac{\partial \bar{x}^i}{\partial x^i} \right| = \begin{vmatrix} \frac{\partial \bar{x}^1}{\partial x^1} & \cdots & \frac{\partial \bar{x}^1}{\partial x^n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial \bar{x}^n}{\partial x^1} & \cdots & \frac{\partial \bar{x}^n}{\partial x^n} \end{vmatrix} \neq 0 \quad (3.15)$$

E podemos inverter a relação (3.14):

$$x^i = x^i(\bar{x}^1, \bar{x}^2, \dots, \bar{x}^n); \quad i = 1, 2, 3, \dots, n \quad (3.16)$$

As Eq. (3.14) e (3.16) são ditas serem as transformações de coordenadas de um sistema no outro.

### 3.4 Vetores e Tensores Contravariantes. Invariantes

Seja  $(x^1, x^2, \dots, x^n)$  ou  $x^i$  as coordenadas de um ponto em um sistema de coordenadas X e  $(\bar{x}^1, \bar{x}^2, \dots, \bar{x}^n)$  ou  $\bar{x}^i$  as coordenadas do mesmo ponto no sistema Y.

Seja também  $A^i, i = 1, \dots, n$ ,  $n$  funções de coordenadas  $x^1, x^2, \dots, x^n$  no sistema X. Se as quantidades  $A^i$  são transformadas para  $\bar{A}^i$  no sistema de coordenadas Y de acordo com:

$$\bar{A}^i = \frac{\partial \bar{x}^i}{\partial x^j} A^j \text{ ou } A^j = \frac{\partial x^j}{\partial \bar{x}^i} \bar{A}^i \quad (3.17)$$

Então  $A^i$  são chamadas *componentes de um vetor contravariante*.

Um exemplo de vetor contravariante é o deslocamento infinitesimal. Considere um ponto P de coordenadas  $x^i$  ( $i = 1, 2, 3$ ) e um ponto vizinho Q de coordenadas  $x^i + dx^i$  no sistema X. Esses dois pontos definem um deslocamento infinitesimal  $\overrightarrow{PQ}$ , descritas pelas 3 componentes  $dx^i$ . No sistema de coordenadas Y, essas componentes são  $d\bar{x}^i$ . As componentes de  $\overrightarrow{PQ}$  nos dois sistemas conectam-se pelas equações:

$$\begin{aligned} d\bar{x}^1 &= \frac{\partial \bar{x}^1}{\partial x^1} dx^1 + \frac{\partial \bar{x}^1}{\partial x^2} dx^2 + \frac{\partial \bar{x}^1}{\partial x^3} dx^3 \\ d\bar{x}^2 &= \frac{\partial \bar{x}^2}{\partial x^1} dx^1 + \frac{\partial \bar{x}^2}{\partial x^2} dx^2 + \frac{\partial \bar{x}^2}{\partial x^3} dx^3 \\ d\bar{x}^3 &= \frac{\partial \bar{x}^3}{\partial x^1} dx^1 + \frac{\partial \bar{x}^3}{\partial x^2} dx^2 + \frac{\partial \bar{x}^3}{\partial x^3} dx^3 \end{aligned} \quad (3.18)$$

Ou então, de maneira mais compacta, usando a convenção de Einstein:

$$d\bar{x}^i = \frac{\partial \bar{x}^i}{\partial x^j} dx^j \quad (3.19)$$

Que é a lei de transformação de vetores contravariantes. Então  $dx^i$  são componentes de um vetor contravariante.

Prosseguindo, pode-se definir entes da classe contravariante que apresentam características mais complicadas que o vetor contravariante.

Seja  $A^{ij}$  ( $i, j = 1, 2, \dots, n$ )  $n^2$  funções das coordenadas  $x^1, x^2, \dots, x^n$  no sistema de coordenadas X. Se as quantidades  $A^{ij}$  são transformadas para  $\bar{A}^{ij}$  no sistema de coordenadas Y, tendo coordenadas  $\bar{x}^1, \bar{x}^2, \dots, \bar{x}^n$ , de acordo com

$$\bar{A}^{ij} = \frac{\partial \bar{x}^i}{\partial x^k} \frac{\partial \bar{x}^j}{\partial x^l} A^{kl} \quad (3.20)$$

Então  $A^{ij}$  são chamadas *componentes de um tensor contravariante de rank* (ou ordem) 2 ( $n^2$  componentes).

Agora indo na direção oposta, nota-se que um vetor contravariante é na verdade um tensor contravariante de *rank* 1 ( $n^1$  componentes) e isto sugere a existência de um tensor contravariante de ordem zero ( $n^0 = 1$  componente).

Uma função  $\varphi(x^1, x^2, \dots, x^n)$  é chamado *invariante* ou *escalar* se seus valores originais não mudam sob uma transformação de coordenadas de  $x^1, x^2, \dots, x^n$  para  $\bar{x}^1, \bar{x}^2, \dots, \bar{x}^n$ , i.e.,

$$\varphi(x^1, x^2, \dots, x^n) = \varphi(\bar{x}^1, \bar{x}^2, \dots, \bar{x}^n) \quad (3.21)$$

Por exemplo,  $A^i B_i$  é um escalar.

### 3.5 Vetores e Tensores Covariantes. Tensores Mistos

Seja  $A_i$  ( $i = 1, 2, \dots, n$ )  $n$  funções de coordenadas  $x^1, x^2, \dots, x^n$  em um sistema de coordenadas X. Se as quantidades  $A_i$  são transformadas para  $\bar{A}_i$ , no sistema de coordenadas Y, de acordo com

$$\bar{A}_i = \frac{\partial x^j}{\partial \bar{x}^i} A_j \text{ ou } A_i = \frac{\partial \bar{x}^j}{\partial x^i} \bar{A}_j \quad (3.22)$$

Então,  $A_i$  são chamadas *componentes de um vetor covariante*.

Como exemplo, considere uma função escalar  $\varphi(x^1, x^2, \dots, x^n)$ , então:

$$d\varphi = \frac{\partial\varphi}{\partial x^1} \partial x^1 + \frac{\partial\varphi}{\partial x^2} \partial x^2 + \dots + \frac{\partial\varphi}{\partial x^n} \partial x^n$$

$$\frac{\partial\varphi}{\partial \bar{x}^i} = \frac{\partial\varphi}{\partial x^1} \frac{\partial x^1}{\partial \bar{x}^i} + \frac{\partial\varphi}{\partial x^2} \frac{\partial x^2}{\partial \bar{x}^i} + \dots + \frac{\partial\varphi}{\partial x^n} \frac{\partial x^n}{\partial \bar{x}^i}$$

$$\frac{\partial\varphi}{\partial \bar{x}^i} = \frac{\partial\varphi}{\partial x^j} \frac{\partial x^j}{\partial \bar{x}^i} = \frac{\partial x^j}{\partial \bar{x}^i} \frac{\partial\varphi}{\partial x^j} \quad (3.23)$$

Nota-se que essa lei de transformação se assemelha muito com a de vetores contravariantes, porém, as variáveis  $x^j$  e  $\bar{x}^i$  aparecem em lugares trocados nas derivadas. Essa é a lei de transformação de vetores covariantes.

Agora seja  $A_{ij}$  ( $i, j = 1, 2, \dots, n$ )  $n^2$  funções das coordenadas  $x^1, x^2, \dots, x^n$  no sistema de coordenadas  $X$ . Se as quantidades  $A_{ij}$  são transformadas para  $\bar{A}_{ij}$ , de coordenadas  $\bar{x}^1, \bar{x}^2, \dots, \bar{x}^n$  no sistema  $Y$ , de acordo com:

$$\bar{A}_{ij} = \frac{\partial x^k}{\partial \bar{x}^i} \frac{\partial x^l}{\partial \bar{x}^j} A_{kl} \quad (3.24)$$

Então,  $A_{ij}$  são chamados *componentes de um tensor covariante de rank (ou ordem) 2*.

Os invariantes também podem ser considerados como tensores de *rank 0* e os vetores covariantes, como tensores de *rank (ou ordem) 1*.

Uma vez definidos os tensores contravariantes e os covariantes, não é difícil definir tensores com caráter tanto contravariante quanto covariante: são os chamados *tensores mistos*.

Seja  $A_j^i$  ( $i, j = 1, 2, \dots, n$ )  $n^2$  funções das coordenadas  $x^1, x^2, \dots, x^n$  no sistema de coordenadas  $X$ . Se as quantidades  $A_j^i$  são transformadas para  $\bar{A}_j^i$ , de coordenadas  $\bar{x}^1, \bar{x}^2, \dots, \bar{x}^n$  no sistema  $Y$ , de acordo com:

$$\bar{A}_j^i = \frac{\partial \bar{x}^i}{\partial x^k} \frac{\partial x^l}{\partial \bar{x}^j} A_j^i \quad (3.25)$$

Então,  $A_j^i$  são chamados *componentes de um vetor misto de rank (ou ordem)*

2. O delta de Kronecker é um bom exemplo de tensor misto de ordem 2:

$$\bar{\delta}_j^i = \frac{\partial \bar{x}^i}{\partial \bar{x}^j} = \frac{\partial \bar{x}^i}{\partial x^k} \frac{\partial x^l}{\partial \bar{x}^j} \frac{\partial x^k}{\partial x^l}$$

$$\bar{\delta}_j^i = \frac{\partial \bar{x}^i}{\partial x^k} \frac{\partial x^l}{\partial \bar{x}^j} \delta_l^k \quad (3.26)$$

Os tensores contravariantes sempre serão denotados por índices superiores (sobrescrito) enquanto que tensores covariantes serão denotados por índices inferiores (subscrito). Assim como tensores de *rank* 1 podem ser visualizados como vetores, tensores de *rank* 2 podem ser visualizados como matrizes  $n \times n$ , no espaço  $n$ -dimensional.

No espaço tridimensional, um tensor de rank  $N$  ( $N$  índices) possui  $3^N$  componentes. Em um espaço  $n$ -dimensional, um tensor de rank  $N$  ( $N$  índices) possui  $n^N$  componentes. Como neste trabalho não será utilizado a extensão da definição de tensores contravariantes e covariantes para ordens superiores a 2, sugere-se a leitura da referência <sup>48</sup>.

### 3.6 Interpretação Geométrica

Um mesmo tensor pode ser representado por suas componentes contravariantes ou covariantes, como será visto logo mais. Para se ter uma intuição geométrica do que significa contravariância e covariância, considere um tensor de rank 1, ou seja, um vetor. Por simplicidade, o vetor estará no plano.

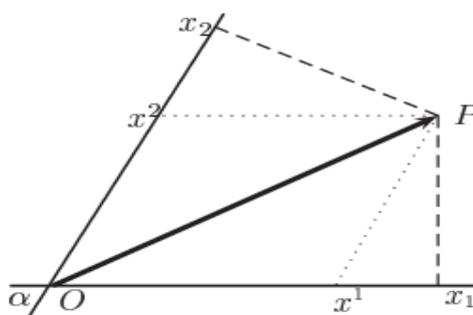


Figura 9. Representação de um vetor em eixos não ortogonais.  $(x^1, x^2)$  são as componentes contravariantes e  $(x_1, x_2)$  são as covariantes.<sup>50</sup>

Quando se utilizam bases não ortogonais para representar um vetor nota-se que há duas maneiras diferentes de fazê-lo: por projeções ortogonais e projeções paralelas (Fig. 8). As componentes do vetor  $\overrightarrow{OP}$  formadas pelas projeções paralelas,  $(x^1, x^2)$ , são chamadas componentes contravariantes e denotadas por índices superiores. Já as componentes formadas pelas projeções perpendiculares,  $(x_1, x_2)$ , são chamadas componentes covariantes e denotadas por índices inferiores. Obviamente, num sistema de coordenadas ortogonal, essas duas projeções coincidem, i.e., as componentes contravariantes e covariantes são iguais (Seção 2.8.1).

Mas por que, então, não chamar essas componentes de “componentes paralelas” e “componentes ortogonais”? O significado dos nomes *contravariante* e *covariante*, têm a ver com a maneira com que os componentes variam sob uma transformação da base. As componentes de um vetor contravariante (tais como vetor posição e suas derivadas) se transformam de maneira *oposta* ao eixo de coordenadas, ou seja, *contra variam* para compensar a transformação (uma vez que uma quantidade vetorial independe do sistema de coordenadas). Já as componentes de um vetor covariante (tais como o gradiente de uma função escalar) se transformam da mesma maneira dos eixos de coordenadas, ou seja, *variam com* a base para compensar a transformação.

### 3.7 Operações Fundamentais com Tensores

O que segue são algumas importantes operações com tensores as quais são utilizadas para derivar equações especiais e provar várias identidades.

#### 3.7.1 Adição e Subtração

Dois tensores de mesma ordem e tipo podem ser somados ou subtraídos, resultando em outro de mesma ordem e tipo. Assim, se  $A_{ij}^k$  e  $B_{ij}^k$  denotam dois tensores mistos, as grandezas  $S_{ij}^k$  e  $D_{ij}^k$  são definidas por

$$S_{ij}^k = A_{ij}^k + B_{ij}^k \quad e \quad D_{ij}^k = A_{ij}^k - B_{ij}^k \quad (3.27)$$

são a soma e a subtração de  $A_{ij}^k$  e  $B_{ij}^k$ , respectivamente. É fácil provar que as quantidades  $S_{ij}^k$  e  $D_{ij}^k$  acima são tensores.

### 3.7.2 Produto Externo

Através da multiplicação de cada componente de um tensor de ordem  $m$  por cada componente de um tensor de ordem  $n$  obtêm-se os componentes de um tensor de ordem  $m + n$  chamado *produto externo* (ou *produto direto*) daqueles tensores.

Por exemplo, o produto externo dos tensores  $U_i^{kl}$  e  $W_j^m$  é o tensor  $T_{ij}^{klm} = U_i^{kl}W_j^m$ , que é um tensor misto de ordem cinco. A seguir, um produto externo de tensores covariantes e contravariantes resultando em outros tensores covariantes e contravariantes, respectivamente

$$T_{ijk} = U_{ij}W_k, \quad T^{ijkl} = U^{ij}W^{kl} \quad (3.28)$$

### 3.7.3 Contração

A *Contração* de um tensor misto qualquer é feita igualando-se um índice covariante a um índice contravariante e somando em relação a este índice (convenção de Einstein), assim formando um tensor cuja ordem é duas unidades a menos que a do tensor original. Por exemplo, do tensor misto de 4ª ordem  $T_{ij}^{kl}$ , igualando os índices  $i$  e  $k$ , obtemos o tensor misto de 2ª ordem:

$$T_j^l = T_{ij}^{il} \quad (3.29)$$

E deste, com uma segunda contração (igualando  $j$  e  $l$ ), obtemos o tensor de ordem zero:

$$T = T_j^j = T_{ij}^{il} \quad (3.30)$$

Acima, após as contrações, os tensores resultantes, mesmo sendo, em geral, diferentes do tensor original, continuam denotados pela letra T: a distinção é feita através dos índices.

O resultado da contração também possui caráter tensorial.

### 3.7.4 Produto Interno

Consiste numa combinação do produto externo com a contração. Por exemplo, dados os tensores  $U_i^{jk}$  e  $W_{lm}^n$ , podemos formar o produto externo  $U_i^{jk}W_{lm}^n$  e depois contrair os índices  $i$  e  $n$  para obter o produto interno  $U_i^{jk}W_{lm}^i$  daqueles tensores. Fazendo agora  $k = m$  obtemos um outro produto interno:  $U_i^{jk}W_{lk}^i$ .

### 3.7.5 Tensores Simétricos e Antissimétricos

Um tensor é dito ser *simétrico em relação a dois índices contravariantes ou covariantes* se forem iguais os dois componentes que se obtêm pela troca dos dois considerados; neste caso, o próprio tensor é dito *simétrico*. Assim, se

$$T_{lm}^{ijk} = T_{lm}^{kji} \quad (3.31)$$

Para todas as combinações dos índices  $i$  e  $j$  então o tensor é simétrico pois apresenta simetria nesses índices.

A simetria é uma propriedade que independe do sistema de referência. Para um tensor  $T^{ij}$ , segue que:

$$\bar{T}^{ij} = \frac{\partial \bar{x}^i}{\partial x^k} \frac{\partial \bar{x}^j}{\partial x^l} T^{kl} \stackrel{(a)}{=} \frac{\partial \bar{x}^i}{\partial x^l} \frac{\partial \bar{x}^j}{\partial x^k} T^{lk} \stackrel{(b)}{=} \frac{\partial \bar{x}^i}{\partial x^l} \frac{\partial \bar{x}^j}{\partial x^k} T^{kl} \stackrel{(c)}{=} \bar{T}^{ji} \quad (3.32)$$

em que na passagem (a) são trocados os papéis das letras  $k$  e  $l$ , na passagem (b) é usada a simetria de  $T^{ij}$  e na passagem (c) é usada a definição de tensor contravariante de ordem 2 (Eq. 3.20).

Um tensor é dito ser *antissimétrico em relação a dois índices contravariantes ou covariantes* se os dois componentes que se obtêm pela troca dos dois índices considerados são nulos ou diferem apenas no sinal; nestes caso, o próprio tensor é dito *antissimétrico*. Assim, se

$$T_{lm}^{ijk} = -T_{lm}^{kji} \quad (3.33)$$

Para todas as combinações dos índices  $i$  e  $k$  então o tensor é antissimétrico pois apresenta antissimetria nesses dois índices.

Em quatro dimensões, observe que, dos 16 componentes do tensor antissimétrico  $T^{ij}$ , os quatro componentes  $T^{ii}$  (sem somatório) são nulos; os 12 restantes, quando não nulos, são iguais em módulo e de sinais contrários aos pares, de modo que, genericamente, apenas seis componentes são independentes. Analogamente, de maneira genérica, tensores antissimétricos de terceira ordem  $T^{ijk}$  tem somente quatro componentes independentes, enquanto o tensor antissimétrico  $T^{ijkl}$  tem só um. Não há tensores antissimétricos de ordem superior a quatro em quatro dimensões.

É importante notar que simetria ou antissimetria refere-se apenas a dois índices contravariantes ou dois índices covariantes. Assim, não dizemos haver simetria quando  $T_i^j = T_j^i$ ; tal relação, em geral, não se transmite de um sistema de coordenadas para outro.

### 3.7.6 Tensor Simétrico Conjugado (ou Recíproco)

Considere um tensor simétrico covariante  $A_{ij}$  de ordem 2. Seja  $d$  o determinante  $|A_{ij}|$  com os elementos  $A_{ij}$  i.e.,  $d = |A_{ij}|$  e  $d \neq 0$ .

Será definido  $A^{ij}$  por:

$$A^{ij} = \frac{\text{Cofator } A_{ij} d}{d} = \frac{B_{ij}}{d} \quad (3.34)$$

$A^{ij}$  é um tensor simétrico contravariante de ordem 2, o qual é chamado *tensor conjugado (ou recíproco) de  $A_{ij}$* .

Pode ser demonstrado que da definição acima temos que: <sup>48</sup>

$$A_{ij} A^{kj} = \delta_i^k \quad (3.35)$$

### 3.7.7 Lei do Quociente

Por esta lei pode-se testar se uma dada quantidade é um tensor ou não. Se um produto interno de  $U$  com um tensor *arbitrário* for um tensor, então  $U$  será também um tensor. Esta é a *lei do quociente*.

### 3.8 O Tensor Métrico

Em coordenadas cartesianas  $(x, y, z)$ , o quadrado da distância entre dois pontos infinitesimalmente próximos é:

$$ds^2 = dx^2 + dy^2 + dz^2 \quad (3.36)$$

No espaço  $n$ -dimensional, dizemos que as coordenadas  $\bar{x}^i$  são *cartesianas* se o quadrado da distância entre dois pontos infinitesimalmente próximos  $P(\bar{x})$  e  $P(\bar{x} + d\bar{x})$  é dado pela fórmula *Pitagórica*:

$$ds^2 = d\bar{x}^k d\bar{x}^k \quad (k = 1, 2, \dots, n) \quad [\bar{x}^k: \text{coord. cartesianas}] \quad (3.37)$$

A equação acima é a extensão natural da Eq. (3.36) para espaços com mais de três dimensões. Escrevendo esta equação em coordenadas  $x^i$  genéricas, o qual é feito substituindo  $d\bar{x}^k = (\partial\bar{x}^k/\partial x^i)dx^i$ , obtemos uma forma quadrática dos diferenciais das coordenadas em sua expressão mais geral, denominada *forma fundamental* ou *forma métrica* (ou simplesmente *métrica*):

$$ds^2 = g_{ij}dx^i dx^j \quad (3.38)$$

Em que

$$g_{ij}(x) \equiv \frac{\partial\bar{x}^k}{\partial x^i} \frac{\partial\bar{x}^k}{\partial x^j} \quad [\bar{x}^k: \text{coord. cartesianas}] \quad (3.39)$$

É o chamado *tensor métrico* ou *tensor fundamental* do espaço. Será demonstrado que  $g_{ij}$ , de fato, se transforma como um tensor covariante de ordem 2, pois, sob a mudança de coordenadas  $x^i$  para  $\bar{x}^i$  ( $\bar{x}^i$  são cartesianas), temos que:

$$g_{ij}(x) \equiv \frac{\partial\bar{x}^k}{\partial x^i} \frac{\partial\bar{x}^k}{\partial x^j} = \frac{\partial\bar{x}^k}{\partial\bar{x}^m} \frac{\partial\bar{x}^m}{\partial x^i} \frac{\partial\bar{x}^k}{\partial\bar{x}^n} \frac{\partial\bar{x}^n}{\partial x^j} = \frac{\partial\bar{x}^m}{\partial x^i} \frac{\partial\bar{x}^n}{\partial x^j} \underbrace{\frac{\partial\bar{x}^k}{\partial\bar{x}^m} \frac{\partial\bar{x}^k}{\partial\bar{x}^n}}_{\bar{g}_{mn}(\bar{x})} = \frac{\partial\bar{x}^m}{\partial x^i} \frac{\partial\bar{x}^n}{\partial x^j} \bar{g}_{mn}(\bar{x}) \quad (3.40)$$

Logo,  $ds^2$ , sendo o produto dos tensores no 2º membro da Eq. (3.36), também é um tensor: um invariante, no caso, como era de se esperar, uma vez que a distância entre dois pontos não deve depender das coordenadas utilizadas no seu cálculo. O tensor métrico é um tensor simétrico, ou seja,  $g_{ij} = g_{ji}$ . As demonstrações de que (3.37) é um invariante e  $g_{ij}$  é simétrico podem ser encontradas em<sup>48</sup>.

Entretanto, existem “espaços” onde não é possível introduzir um sistema de coordenadas cartesianas. Como exemplo, considere o “espaço” bidimensional formado pelos pontos na superfície de uma esfera de raio  $R$ , onde a distância entre dois pontos infinitesimalmente próximos é dada em termos das coordenadas esféricas  $\theta$  e  $\varphi$  (co-latitudes e longitude, respectivamente) por:

$$ds^2 = R^2 d\theta^2 + R^2 \sin^2 \theta d\varphi^2 \quad (3.41)$$

Não existem coordenadas (digamos  $\xi$  e  $\eta$ ) em termos das quais essa forma quadrática tome a forma  $ds^2 = d\xi^2 + d\eta^2$ , como na Eq. (3.35) com  $n = 2$ . Uma maneira de introduzir tais espaços consiste em definir espaços dotados do conceito de distância como segue:

*Tem-se um espaço métrico ou riemanniano sempre que a distância quadrática infinitesimal puder ser escrita como uma forma quadrática dos diferenciais das coordenadas que seja invariante; i.e.,*

$$ds^2 = g_{ij} dx^i dx^j = \text{invariante} \quad (3.42)$$

Num tal espaço, se a métrica for *definida positiva* ( $g_{ij} dx^i dx^j > 0$  exceto se os diferenciais  $dx^i$  se anulam) e for possível introduzir as chamadas *coordenadas cartesianas*, nas quais o tensor métrico e a distância quadrática infinitesimal tomam as formas especiais:

$$g_{ij} \doteq 1 \text{ se } i = j \text{ e } \bar{g}_{ij} \doteq 0 \text{ se } i \neq j \leftrightarrow ds^2 = (d\bar{x}^1)^2 + (d\bar{x}^2)^2 + \dots + (d\bar{x}^n)^2 \quad (3.43)$$

são válidas em todos os pontos, dizemos que o espaço é *euclidiano* (foi usado o sinal  $\doteq$  para indicar que a igualdade só é válida num sistema de coordenadas específico). Espaços euclidianos são, portanto, casos especiais de espaços riemannianos.

### O tensor fundamental contravariante

O *tensor conjugado métrico* para  $g_{ij}$ , o qual é escrito como  $g^{ij}$ , é definido por:

$$g^{ij} = \frac{G_{ij}}{g} \quad (3.44)$$

Em que  $G_{ij}$  é o cofator de  $g_{ij}$  no determinante  $g = |g_{ij}| \neq 0$ .

Da propriedade de tensores conjugados tem-se que:

$$g_{ij}g^{kj} = \delta_i^k \quad (3.45)$$

Lembrando que, para qualquer matriz  $(a_{ij})$ . O elemento  $a_{ij}^{-1}$  da sua inversa é dado por:

$$a_{ij}^{-1} = \frac{A_{ji}}{a} \quad (3.46)$$

Em que  $A_{ji}$  é o cofator do elemento  $a_{ij}$  no determinante  $a = |a_{ij}|$ , e considerando a simetria de  $G^{ij}$  nos índices  $i$  e  $j$  (uma vez que se trata dos cofatores dos elementos do determinante simétrico  $|g_{ij}|$ ), vê-se que as grandezas  $g^{ij}$  definidas através da Eq. (3.44) são os elementos da matriz inversa (também simétrica) da matriz  $(g_{ij})$ . Em vista disso, o 1º membro da Eq. (3.45) é reconhecido como o cálculo de um elemento genérico do produto da matriz  $(g_{ij})$  pela sua inversa.

Usando a Eq. (3.45) pode-se mostrar que  $g^{ij}$  é um tensor contravariante de ordem 2. Note ainda que essa equação mostra um fato já comprovado na Eq. (3.26), de que o delta de Kronecker é um tensor.

### 3.8.1 A formação de novos tensores por meio dos tensores fundamentais

Os tensores fundamentais  $g_{ij}$  e  $g^{ij}$  podem ser usados nas operações de *abaixar* e *levantar* índices tensoriais assim definidas:

$$T_{\dots i \dots} = g_{im} T^{\dots m \dots} e T^{\dots j \dots} = g^{jn} T_{\dots n \dots} \quad (3.47)$$

Em que diz-se que o tensor  $T$  teve seu índice  $m$  *abaixado* como  $i$  na primeira operação e seu índice  $n$  *levantado* como  $j$  na segunda.

Dado um tensor, este e os que dele resultam abaixando e levantando índices são denominados *tensores associados*; é usada a mesma letra para denotá-los. Tensores associados são vistos como representações de um mesmo objeto geométrico (de fato, a relação  $X_i = g_{ij}X^j$  estabelece um isomorfismo entre vetores covariantes e contravariantes associados <sup>49</sup>). Exemplos: (a)  $g_{ij}$ ,  $g^{ij}$ , e  $\delta_j^i (= g_{jk}g^{ki})$  são diferentes representações da *métrica* do espaço; (b) o vetor contravariante  $dx^j$  e o vetor covariante  $dx_i = g_{ij}dx^j$  representam o mesmo deslocamento infinitesimal  $\overrightarrow{PQ}$  desde o ponto  $P(x^j)$  até o ponto  $Q(x^j + dx^j)$ .

A liberdade de levantar e baixar índices exige cuidado com a ordem horizontal na qual os índices contravariantes e covariantes são escritos. Por exemplo, em geral,  $X_i^j$  será diferente de  $X_j^i$ , sendo iguais quando  $X^{ij}$  for simétrico:

$$X_i^j - X_j^i = g_{ik}X^{kj} - g_{ik}X^{jk} = g_{ik}(X^{kj} - X^{jk}) = 0 \leftrightarrow X^{kj} = X^{jk} \quad (3.48)$$

Nas coordenadas cartesianas  $\bar{x}^i$ , o tensor métrico é dado pela Eq. (3.43) e, portanto,  $\bar{A}_i = \bar{g}_{ij}\bar{A}^j = A^i$ , mostrando que os componentes cartesianos de um vetor não se distinguem quanto ao tipo covariante ou contravariante; isso é válido para os componentes *cartesianos* de um tensor qualquer. Portanto, qualquer que seja o tipo de tensor, seus cartesianos podem ser denotados com índices subscritos apenas, prática comum na literatura.

### 3.8.2 Magnitude de um vetor e ângulo entre vetores

O escalar  $X^i Y_i$  obtido pelo produto interno de  $X^i$  com  $Y_i$  reduz-se ao produto escalar familiar no sistema de coordenadas cartesianas. Pode-se, assim, definir a *magnitude* de um vetor  $X^i$  ou o seu associado  $X_i$  como sendo dado por:

$$X^2 \equiv X^i X_i (= g_{ij}X^i X^j = g^{ij}X_i X_j) \quad (3.49)$$

Pode-se definir o ângulo  $\theta$  entre os vetores  $A^i$  e  $B^j$  como sendo o produto interno dos vetores unitários  $\alpha_i$  e  $\beta_j$  obtidos a partir daqueles vetores:

$$\cos \theta \equiv \alpha^i \beta_i, \quad \text{em que } \alpha^i \equiv A^i / \sqrt{A^2} \text{ e } \beta_i \equiv B_i / \sqrt{B^2} \quad (3.50)$$

É fácil ver que esses dois conceitos (magnitude e ângulo) são invariantes e se reduzem aos conceitos familiares no espaço euclidiano tridimensional.

### 3.9 A Equação da Geodésica

Considere todas as curvas que ligam dois pontos fixos  $P_1$  e  $P_2$ . Em geral, dentre todas essas curvas, apenas uma, denominada *geodésica entre  $P_1$  e  $P_2$* , tem comprimento menor que o de todas as outras curvas. Segue um método de determiná-la.

Admita que uma das curvas que ligam  $P_1$  e  $P_2$  tenha a parametrização:

$$x^i = x^i(t), \quad t \in [t_1, t_2] \quad (3.51)$$

Em que  $t$  é um parâmetro genérico e  $x^i(t_1)$  e  $x^i(t_2)$  são, respectivamente, as coordenadas de  $P_1$  e  $P_2$ . O seu elemento de comprimento é:

$$ds = \sqrt{ds^2} = \sqrt{g_{ij}dx^i dx^j} = \sqrt{g_{ij}\dot{x}^i \dot{x}^j} dt \quad (3.52)$$

Logo, seu comprimento é:

$$L = \int_{t_1}^{t_2} \dot{s} dt, \quad \text{com } \dot{s} \equiv \sqrt{g_{ij}\dot{x}^i \dot{x}^j} \quad (3.53)$$

As equações paramétricas  $x^k(t)$  da geodésica minimizam a integral que fornece  $L$ , as quais, segundo o Cálculo das Variações, são dadas pelas equações de Euler-Lagrange:

$$\frac{d}{dt} \left( \frac{\partial \dot{s}}{\partial \dot{x}^k} \right) - \frac{\partial \dot{s}}{\partial x^k} = 0 \quad (3.54)$$

Lembrando que  $g_{ij}$  não depende explicitamente de  $\dot{x}^k$ , temos que:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \dot{s}}{\partial \dot{x}^k} &= \frac{\partial}{\partial \dot{x}^k} \sqrt{g_{ij}\dot{x}^i \dot{x}^j} = \frac{1}{2\sqrt{g_{ij}\dot{x}^i \dot{x}^j}} \frac{\partial (g_{ij}\dot{x}^i \dot{x}^j)}{\partial \dot{x}^k} = \frac{g_{ij}}{2\dot{s}} \left( \frac{\partial \dot{x}^i}{\partial \dot{x}^k} \dot{x}^j + \dot{x}^i \frac{\partial \dot{x}^j}{\partial \dot{x}^k} \right) \\ &= \frac{g_{ij}}{2\dot{s}} (\delta_k^i \dot{x}^j + \dot{x}^i \delta_k^j) = \frac{g_{kj}\dot{x}^j + g_{ik}\dot{x}^i}{2\dot{s}} = \frac{2g_{kj}\dot{x}^j}{2\dot{s}} = \frac{g_{kj}\dot{x}^j}{\dot{s}} \end{aligned}$$

e que

$$\frac{\partial \dot{s}}{\partial x^k} = \frac{1}{2\dot{s}} \frac{\partial}{\partial x^k} (g_{ij}\dot{x}^i \dot{x}^j) = \frac{1}{2\dot{s}} \frac{\partial g_{ij}}{\partial x^k} \dot{x}^i \dot{x}^j ;$$

esses resultados substituídos na Eq. (3.54) fornecem:

$$\frac{d}{dt} \left( \frac{g_{kj}\dot{x}^j}{\dot{s}} \right) - \frac{1}{2\dot{s}} \frac{\partial g_{ij}}{\partial x^k} \dot{x}^i \dot{x}^j = 0. \quad (3.55)$$

Até agora, usamos um parâmetro completamente genérico ao longo da geodésica, solução da equação acima. Se tomarmos como parâmetro o comprimento do arco medido desde o ponto  $P_1$ , então  $\dot{s} = 1$  e  $\ddot{s} = 0$ , passando a equação acima a ter a forma:

$$\frac{d}{ds} \left( g_{kj} \frac{dx^j}{ds} \right) - \frac{1}{2} \frac{\partial g_{ij}}{\partial x^k} \frac{dx^i}{ds} \frac{dx^j}{ds} = g_{kj} \frac{d^2 x^j}{ds^2} + \frac{dg_{kj}}{ds} \frac{dx^j}{ds} - \frac{1}{2} \frac{\partial g_{ij}}{\partial x^k} \frac{dx^i}{ds} \frac{dx^j}{ds} = 0$$

O segundo termo pode ser escrito assim:

$$\frac{dg_{kj}}{ds} \frac{dx^j}{ds} = \frac{\partial g_{kj}}{\partial x^i} \frac{dx^i}{ds} \frac{dx^j}{ds} = \frac{1}{2} \frac{\partial g_{kj}}{\partial x^i} \frac{dx^i}{ds} \frac{dx^j}{ds} + \frac{1}{2} \frac{\partial g_{ki}}{\partial x^j} \frac{dx^j}{ds} \frac{dx^i}{ds}$$

Logo, substituindo essa equação na anterior, obtemos:

$$g_{kj} \frac{d^2 x^j}{ds^2} + \frac{1}{2} \left( \frac{\partial g_{kj}}{\partial x^i} + \frac{\partial g_{ki}}{\partial x^j} - \frac{\partial g_{ij}}{\partial x^k} \right) \frac{dx^i}{ds} \frac{dx^j}{ds} = 0$$

Introduzindo nesta equação o *símbolo de Christoffel de 1ª espécie*,

$$[ij, k] \equiv \frac{1}{2} \left( \frac{\partial g_{kj}}{\partial x^i} + \frac{\partial g_{ki}}{\partial x^j} - \frac{\partial g_{ij}}{\partial x^k} \right) \quad (3.56)$$

ela se torna, com  $s$  no lugar de  $k$  (não confundir o índice  $s$  com o comprimento de arco  $s$ ),

$$g_{sj} \frac{d^2 x^j}{ds^2} + [ij, s] \frac{dx^i}{ds} \frac{dx^j}{ds} = 0$$

Finalmente, multiplicando por  $g^{ks}$  e introduzindo agora o *símbolo de Christoffel de 2ª espécie*,

$$\left\{ \begin{matrix} k \\ ij \end{matrix} \right\} \equiv g^{ks} [ij, s], \quad (3.57)$$

Encontramos a *equação da geodésica*:

$$\boxed{\frac{d^2 x^k}{ds^2} + \left\{ \begin{matrix} k \\ ij \end{matrix} \right\} \frac{dx^i}{ds} \frac{dx^j}{ds} = 0} \quad (3.58)$$

As Eq. (3.58), na verdade, são  $n$  equações diferenciais de 2ª ordem, cuja solução fornece a parametrização  $x^k(s)$  da geodésica no espaço que é caracterizado pela métrica  $g_{ij}$ , num espaço  $n$ -dimensional. Sua integral completa envolve  $2n$  constantes arbitrárias. Estas constantes podem ser determinadas por  $n$  coordenadas de um ponto  $P$  sobre a curva e as  $n$  componentes de um vetor unitário na direção da curva em  $P$ . Então, em geral, uma e somente uma geodésica passa por um ponto e em uma dada direção. Fisicamente, uma geodésica é a trajetória seguida por uma partícula com aceleração nula (Sec. 3.11).

Note que, pela Eq. (3.56), o símbolo de Christoffel é simétrico nos dois primeiros índices ( $i$  e  $j$ , no caso) e portanto, pela Eq. (3.57), que também o de 2ª espécie é simétrico, mas nos dois índices inferiores. Da Eq. (3.57), é fácil deduzir que:

$$\left\{ \begin{matrix} S \\ ij \end{matrix} \right\} \equiv g_{sk} [ij, k] \quad (3.59)$$

As seguintes relações envolvendo os símbolos de Christoffel e a métrica serão úteis:

$$\left. \begin{aligned} \left\{ \begin{matrix} i \\ ii \end{matrix} \right\} &= \frac{1}{2g_{ii}} \frac{\partial g_{ii}}{\partial x^i} \\ \left\{ \begin{matrix} i \\ ij \end{matrix} \right\} &= \frac{1}{2g_{ii}} \frac{\partial g_{ii}}{\partial x^j} \\ \left\{ \begin{matrix} i \\ jj \end{matrix} \right\} &= -\frac{1}{2g_{ii}} \frac{\partial g_{jj}}{\partial x^i} \end{aligned} \right\} \text{em que } i \neq j, g_{ij} = 0 \text{ e com a convenção da soma suspensa} \quad (3.60)$$

Na literatura, em vez de  $\left\{ \begin{matrix} S \\ ij \end{matrix} \right\}$  também se usam  $\{ij, s\}$  e  $\Gamma_{ij}^s$ .

### 3.10 Símbolos de Christoffel e Derivada Covariante

Considere o símbolo de Christoffel de 1ª espécie no sistema de coordenadas  $\bar{x}^i$ :

$$\overline{[ij, k]} \equiv \frac{1}{2} \left( \frac{\partial \bar{g}_{jk}}{\partial \bar{x}^i} + \frac{\partial \bar{g}_{ik}}{\partial \bar{x}^j} - \frac{\partial \bar{g}_{ij}}{\partial \bar{x}^k} \right) \quad (3.61)$$

Para obtê-lo no sistema de coordenadas  $x^i$ , calculemos neste sistema o primeiro termo entre parênteses, fazendo uso da regra da cadeia e da lei de transformação da métrica:

$$\frac{\partial \bar{g}_{jk}}{\partial \bar{x}^i} = \frac{\partial}{\partial \bar{x}^i} \left( g_{mn} \frac{\partial x^m}{\partial \bar{x}^j} \frac{\partial x^n}{\partial \bar{x}^k} \right) = \frac{\partial g_{mn}}{\partial x^l} \frac{\partial x^l}{\partial \bar{x}^i} \frac{\partial x^m}{\partial \bar{x}^j} \frac{\partial x^n}{\partial \bar{x}^k} + g_{mn} \left( \frac{\partial^2 x^m}{\partial \bar{x}^i \partial \bar{x}^j} \frac{\partial x^n}{\partial \bar{x}^k} + \frac{\partial x^m}{\partial \bar{x}^j} \frac{\partial^2 x^n}{\partial \bar{x}^i \partial \bar{x}^k} \right).$$

Desta equação, com duas permutações ( $\partial \bar{g}_{jk} / \partial \bar{x}^i \xrightarrow{i \leftrightarrow j} \partial \bar{g}_{ik} / \partial \bar{x}^j \xrightarrow{j \leftrightarrow k} \partial \bar{g}_{ij} / \partial \bar{x}^k$ ), obtemos no sistema  $x^i$  os dois últimos termos da Eq. (3.61); substituindo nesta os resultados, encontramos:

$$\overline{[ij, k]} = \frac{1}{2} \frac{\partial g_{mn}}{\partial x^l} \frac{\partial x^l}{\partial \bar{x}^i} \frac{\partial x^m}{\partial \bar{x}^j} \frac{\partial x^n}{\partial \bar{x}^k} + \frac{1}{2} g_{mn} \left( \frac{\partial^2 x^m}{\partial \bar{x}^i \partial \bar{x}^j} \frac{\partial x^n}{\partial \bar{x}^k} + \frac{\partial x^m}{\partial \bar{x}^j} \frac{\partial^2 x^n}{\partial \bar{x}^i \partial \bar{x}^k} \right)$$

$$\begin{aligned}
& + \frac{1}{2} \underbrace{\frac{\partial g_{mn}}{\partial x^l} \frac{\partial x^l}{\partial \bar{x}^j} \frac{\partial x^m}{\partial \bar{x}^i} \frac{\partial x^n}{\partial \bar{x}^k}}_{l \leftrightarrow m} + \frac{1}{2} g_{mn} \left( \frac{\partial^2 x^m}{\partial \bar{x}^j \partial \bar{x}^i} \frac{\partial x^n}{\partial \bar{x}^k} + \frac{\partial x^m}{\partial \bar{x}^i} \frac{\partial^2 x^n}{\partial \bar{x}^j \partial \bar{x}^k} \right) \\
& - \frac{1}{2} \underbrace{\frac{\partial g_{mn}}{\partial x^l} \frac{\partial x^l}{\partial \bar{x}^k} \frac{\partial x^m}{\partial \bar{x}^i} \frac{\partial x^n}{\partial \bar{x}^j}}_{l, m, n \rightarrow n, l, m} - \frac{1}{2} g_{mn} \left( \frac{\partial^2 x^m}{\partial \bar{x}^k \partial \bar{x}^i} \frac{\partial x^n}{\partial \bar{x}^j} + \frac{\partial x^m}{\partial \bar{x}^i} \frac{\partial^2 x^n}{\partial \bar{x}^k \partial \bar{x}^j} \right) \\
& = \frac{1}{2} \frac{\partial g_{mn}}{\partial x^l} \frac{\partial x^l}{\partial \bar{x}^i} \frac{\partial x^m}{\partial \bar{x}^j} \frac{\partial x^n}{\partial \bar{x}^k} + \frac{1}{2} \frac{\partial g_{ln}}{\partial x^m} \frac{\partial x^m}{\partial \bar{x}^j} \frac{\partial x^l}{\partial \bar{x}^i} \frac{\partial x^n}{\partial \bar{x}^k} - \frac{1}{2} \frac{\partial g_{lm}}{\partial x^n} \frac{\partial x^n}{\partial \bar{x}^k} \frac{\partial x^l}{\partial \bar{x}^i} \frac{\partial x^m}{\partial \bar{x}^j} + g_{mn} \frac{\partial^2 x^m}{\partial \bar{x}^i \partial \bar{x}^j} \frac{\partial x^n}{\partial \bar{x}^k} \\
& = \frac{\partial x^l}{\partial \bar{x}^i} \frac{\partial x^m}{\partial \bar{x}^j} \frac{\partial x^n}{\partial \bar{x}^k} \frac{1}{2} \left( \frac{\partial g_{mn}}{\partial x^l} + \frac{\partial g_{ln}}{\partial x^m} - \frac{\partial g_{lm}}{\partial x^n} \right) + g_{mn} \frac{\partial^2 x^m}{\partial \bar{x}^i \partial \bar{x}^j} \frac{\partial x^n}{\partial \bar{x}^k}
\end{aligned}$$

ou:

$$\overline{[ij, k]} = \frac{\partial x^l}{\partial \bar{x}^i} \frac{\partial x^m}{\partial \bar{x}^j} \frac{\partial x^n}{\partial \bar{x}^k} [lm, n] + g_{mn} \frac{\partial^2 x^m}{\partial \bar{x}^i \partial \bar{x}^j} \frac{\partial x^n}{\partial \bar{x}^k}. \quad (3.62)$$

Esta é a lei de transformação do símbolo de Christoffel de 1ª espécie. Observe que o segundo termo no 2º membro impede que  $\overline{[ij, k]}$  se transforme como um tensor covariante de 3ª ordem.

Será calculado agora o símbolo de Christoffel de 2ª espécie no sistema de coordenadas  $\bar{x}^i$  em termos desses símbolos no sistema de coordenadas  $x^i$ . Usando a Eq. (3.62), temos:

$$\begin{aligned}
\left\{ \begin{matrix} k \\ ij \end{matrix} \right\} &= \bar{g}^{ks} \overline{[ij, s]} = \frac{\partial \bar{x}^k}{\partial x^a} \frac{\partial \bar{x}^s}{\partial x^b} g^{ab} \left( \frac{\partial x^l}{\partial \bar{x}^i} \frac{\partial x^m}{\partial \bar{x}^j} \frac{\partial x^n}{\partial \bar{x}^s} [lm, n] + g_{mn} \frac{\partial^2 x^m}{\partial \bar{x}^i \partial \bar{x}^j} \frac{\partial x^n}{\partial \bar{x}^s} \right) \\
&= \frac{\partial \bar{x}^k}{\partial x^a} \frac{\partial x^l}{\partial \bar{x}^i} \frac{\partial x^m}{\partial \bar{x}^j} \frac{\partial \bar{x}^s}{\partial x^b} \frac{\partial x^n}{\partial \bar{x}^s} \underbrace{g^{ab}}_{\delta_b^n} [lm, n] + \frac{\partial \bar{x}^k}{\partial x^a} \frac{\partial^2 x^m}{\partial \bar{x}^i \partial \bar{x}^j} \frac{\partial \bar{x}^s}{\partial x^b} \frac{\partial x^n}{\partial \bar{x}^s} \underbrace{g^{ab} g_{mn}}_{\delta_m^a} \\
&= \frac{\partial \bar{x}^k}{\partial x^a} \frac{\partial x^l}{\partial \bar{x}^i} \frac{\partial x^m}{\partial \bar{x}^j} \underbrace{g^{an}}_{\{a\}_{lm}} [lm, n] + \frac{\partial \bar{x}^k}{\partial x^m} \frac{\partial^2 x^m}{\partial \bar{x}^i \partial \bar{x}^j}
\end{aligned}$$

ou (trocando  $a$  por  $n$ ):

$$\left\{ \begin{matrix} k \\ ij \end{matrix} \right\} = \frac{\partial \bar{x}^k}{\partial x^n} \frac{\partial x^l}{\partial \bar{x}^i} \frac{\partial x^m}{\partial \bar{x}^j} \left\{ \begin{matrix} n \\ lm \end{matrix} \right\} + \frac{\partial \bar{x}^k}{\partial x^m} \frac{\partial^2 x^m}{\partial \bar{x}^i \partial \bar{x}^j} \quad (3.63)$$

Esta é a lei d transformação do símbolo de Christoffel de 2ª espécie. Novamente note que é o segundo termo no 2º membro que impede que  $\left\{ \begin{matrix} k \\ ij \end{matrix} \right\}$  se transforme como um tensor misto com um índice contravariante e dois covariantes.

Da Eq. (3.63) pode-se calcular em termos dos símbolos de Christoffel de 2ª espécie uma expressão para  $\partial^2 x^m / \partial \bar{x}^i \partial \bar{x}^j$ . Multiplicando tal equação por  $\partial x^a / \partial \bar{x}^k$ , obtemos:

$$\frac{\partial x^a}{\partial \bar{x}^k} \overline{\left\{ \begin{matrix} k \\ ij \end{matrix} \right\}} = \frac{\partial x^a}{\partial \bar{x}^k} \frac{\partial \bar{x}^k}{\partial x^n} \frac{\partial x^l}{\partial \bar{x}^i} \frac{\partial x^m}{\partial \bar{x}^j} \left\{ \begin{matrix} n \\ lm \end{matrix} \right\} + \frac{\partial x^a}{\partial \bar{x}^k} \frac{\partial \bar{x}^k}{\partial x^m} \frac{\partial^2 x^m}{\partial \bar{x}^i \partial \bar{x}^j},$$

donde:

$$\frac{\partial^2 x^a}{\partial \bar{x}^i \partial \bar{x}^j} = \frac{\partial x^a}{\partial \bar{x}^k} \overline{\left\{ \begin{matrix} k \\ ij \end{matrix} \right\}} - \frac{\partial x^l}{\partial \bar{x}^i} \frac{\partial x^m}{\partial \bar{x}^j} \left\{ \begin{matrix} a \\ lm \end{matrix} \right\} \quad (3.64)$$

Nesta expressão pode-se inverter  $x$  e para  $\bar{x}$  obter:

$$\frac{\partial^2 \bar{x}^a}{\partial x^i \partial x^j} = \frac{\partial \bar{x}^a}{\partial x^k} \left\{ \begin{matrix} k \\ ij \end{matrix} \right\} - \frac{\partial \bar{x}^l}{\partial x^i} \frac{\partial \bar{x}^m}{\partial x^j} \overline{\left\{ \begin{matrix} a \\ lm \end{matrix} \right\}} \quad (3.65)$$

Exceto no caso da diferenciação de uma função  $\varphi(x^i)$  invariante, para a qual  $\partial\varphi/\partial\bar{x}^j = (\partial\varphi/\partial x^i)(\partial x^i/\partial\bar{x}^j)$ , mostrando que  $\partial\varphi/\partial x^i$  é um vetor covariante, as derivadas parciais de tensores não resultam em novos tensores. Considere, por exemplo, um vetor contravariante  $\bar{V}^a$ ; diferenciando em relação a  $\bar{x}^n$  ambos os membros de sua lei de transformação,

$$\bar{V}^a = \frac{\partial \bar{x}^a}{\partial x^j} V^j,$$

obtemos:

$$\frac{\partial \bar{V}^a}{\partial \bar{x}^n} = \frac{\partial x^i}{\partial \bar{x}^n} \frac{\partial}{\partial x^i} \left( \frac{\partial \bar{x}^a}{\partial x^j} V^j \right) = \frac{\partial \bar{x}^a}{\partial x^j} \frac{\partial x^i}{\partial \bar{x}^n} \frac{\partial V^j}{\partial x^i} + \frac{\partial x^i}{\partial \bar{x}^n} \frac{\partial^2 \bar{x}^a}{\partial x^i \partial x^j} V^j.$$

No 2º membro, o 2º termo impede que  $\partial \bar{V}^a / \partial \bar{x}^n$  se transforme como um tensor misto de 2ª ordem com um índice covariante e um contravariante. Entretanto, eliminando a derivada segunda  $\partial^2 \bar{x}^a / \partial x^i \partial x^j$  que aparece naquele termo por meio da Eq. (3.65), encontramos:

$$\begin{aligned}
\frac{\partial \bar{V}^a}{\partial \bar{x}^n} &= \frac{\partial \bar{x}^a}{\partial x^j} \frac{\partial x^i}{\partial \bar{x}^n} \frac{\partial V^j}{\partial x^i} + V^j \frac{\partial x^i}{\partial \bar{x}^n} \left[ \frac{\partial \bar{x}^a}{\partial x^k} \{k\} - \frac{\partial \bar{x}^l}{\partial x^i} \frac{\partial \bar{x}^m}{\partial x^j} \overline{\{a\}} \right] \\
&= \frac{\partial \bar{x}^a}{\partial x^k} \frac{\partial x^i}{\partial \bar{x}^n} \frac{\partial V^k}{\partial x^i} + V^j \frac{\partial x^i}{\partial \bar{x}^n} \frac{\partial \bar{x}^a}{\partial x^k} \{k\} - \underbrace{V^j \frac{\partial \bar{x}^m}{\partial x^j}}_{\bar{V}^m} \underbrace{\frac{\partial x^i}{\partial \bar{x}^n} \frac{\partial \bar{x}^l}{\partial x^i}}_{\delta_n^l} \overline{\{a\}} \\
&= \frac{\partial \bar{x}^a}{\partial x^k} \frac{\partial x^i}{\partial \bar{x}^n} \left[ \frac{\partial V^k}{\partial x^i} + V^j \{k\} \right] - \bar{V}^m \overline{\{a\}}_{nm},
\end{aligned}$$

ou

$$\left[ \frac{\partial \bar{V}^a}{\partial \bar{x}^n} + \bar{V}^m \overline{\{a\}}_{nm} \right] = \frac{\partial \bar{x}^a}{\partial x^k} \frac{\partial x^i}{\partial \bar{x}^n} \left[ \frac{\partial V^k}{\partial x^i} + V^j \{k\} \right] \quad (3.66)$$

Em que vemos que os termos entre colchetes é um tensor misto de 2ª ordem com um índice covariante e um contravariante; a expressão desses termos é usada para definir a *derivada covariante do vetor contravariante*  $V^k$  (em relação a  $x^j$  e com respeito à métrica  $g_{ij}$  incorporada nos símbolos de Christoffel) e é denotada de várias maneiras:

$$\frac{\partial V^k}{\partial x^i} + V^j \{k\}_{ij} \equiv V^k_{;i} \text{ ou } \frac{DV^k}{Dx^i} \text{ ou } \nabla_i V^k \text{ ou } V^k_{;i} \text{ ou } V^k_{||i} \quad (3.67)$$

A Eq. (3.67) mostra que à derivada parcial  $\partial V^k / \partial x^i$  devemos adicionar um termo “corretivo”,  $V^j \{k\}_{ij}$  no caso, para obtermos um tensor: a derivada covariante  $V^k_{;i}$ . Isso vale para qualquer tensor  $T^i_{j\dots n} : T^i_{j\dots n} = \partial T^i_{j\dots n} / \partial x^n + \text{termos "corretivos"}$ .

Considerando agora um vetor covariante  $\bar{V}_j$  e diferenciarmos em relação a  $\bar{x}^i$  a sua lei de transformação,  $\bar{V}_j = V_a (\partial x^a / \partial \bar{x}^j)$ , obtemos:

$$\frac{\partial \bar{V}_j}{\partial \bar{x}^i} = \frac{\partial}{\partial \bar{x}^i} \left( \frac{\partial x^a}{\partial \bar{x}^j} V_a \right) = \frac{\partial x^a}{\partial \bar{x}^j} \frac{\partial x^k}{\partial \bar{x}^i} \frac{\partial V_a}{\partial x^k} + \frac{\partial^2 x^a}{\partial \bar{x}^i \partial \bar{x}^j} V_a.$$

Nesta, eliminando a derivada segunda por meio da Eq. (3.64), encontramos:

$$\frac{\partial \bar{V}_j}{\partial \bar{x}^i} = \frac{\partial x^a}{\partial \bar{x}^j} \frac{\partial x^k}{\partial \bar{x}^i} \frac{\partial V_a}{\partial x^k} + V_a \left[ \frac{\partial x^a}{\partial \bar{x}^k} \overline{\{k\}}_{ij} - \frac{\partial x^l}{\partial \bar{x}^i} \frac{\partial x^m}{\partial \bar{x}^j} \overline{\{a\}}_{lm} \right],$$

ou

$$\begin{aligned}
\underbrace{\frac{\partial \bar{V}_j}{\partial \bar{x}^i} - V_a \frac{\partial x^a}{\partial \bar{x}^k} \overbrace{\{k\}}^{lm}}_{(*)} &= \frac{\partial x^a}{\partial \bar{x}^j} \frac{\partial x^k}{\partial \bar{x}^i} \frac{\partial V_a}{\partial x^k} - \frac{\partial x^l}{\partial \bar{x}^i} \frac{\partial x^m}{\partial \bar{x}^i} \underbrace{V_a \{a\}}_{a \rightarrow k} \\
&= \frac{\partial x^m}{\partial \bar{x}^j} \frac{\partial x^l}{\partial \bar{x}^i} \frac{\partial V_m}{\partial x^l} - \frac{\partial x^l}{\partial \bar{x}^i} \frac{\partial x^m}{\partial \bar{x}^i} V_k \{k\} \\
&= \frac{\partial x^m}{\partial \bar{x}^j} \frac{\partial x^l}{\partial \bar{x}^i} \underbrace{\left[ \frac{\partial V_m}{\partial x^l} - V_k \{k\} \right]}_{(*)}
\end{aligned}$$

Em que vemos que os termos marcados por (\*) formam um tensor covariante de 2ª ordem; isto justifica a seguinte definição para a *derivada covariante de um vetor covariante*:

$$V_{m,l} \equiv \frac{\partial V_m}{\partial x^l} - V_k \{k\} \quad (3.68)$$

A definição de derivada covariante pode ser entendida para qualquer tensor. Pode-se entrever como seria a fórmula da derivada covariante de um tensor genérico por simples inspeção das Eqs. (3.67) e (3.68). Porém, pode-se utilizar o método empregado acima. Como um exemplo, considere a derivada covariante de um tensor misto  $T_j^i$ . Utilizando esse método, é só derivar a lei de transformação  $\bar{T}_j^a = (\partial \bar{x}^a / \partial x^s)(\partial x^b / \partial \bar{x}^j)T_b^s$  em relação  $\bar{x}^i$  e usar as Eqs. (3.64) e (3.65) para eliminar as derivadas segundas. Assim, obtemos:

$$\underbrace{\frac{\partial \bar{T}_j^a}{\partial \bar{x}^i} + \bar{T}_j^m \overbrace{\{a\}}^{lm} - \bar{T}_k^a \overbrace{\{k\}}^{lm}}_{(*)} = \frac{\partial \bar{x}^a}{\partial x^s} \frac{\partial x^b}{\partial \bar{x}^j} \frac{\partial x^r}{\partial \bar{x}^i} \underbrace{\left( \frac{\partial T_b^s}{\partial x^r} + T_b^k \{s\} - T_m^s \{rb\} \right)}_{(*)}$$

Onde vemos que os termos marcados por (\*), um tensor de 3ª ordem com um índice contravariante e dois covariantes, é a derivada covariante desejada:

$$T_b^s{}_{,r} \equiv \frac{\partial T_b^s}{\partial x^r} + T_b^k \{s\} - T_m^s \{rb\} \quad (3.69)$$

Agora é fácil escrever a derivada covariante de qualquer tensor; por exemplo:

$$T_{kl}^{ij}{}_{,n} = \frac{\partial T_{kl}^{ij}}{\partial x^n} + T_{kl}^{sj} \{i\} + T_{kl}^{is} \{j\} - T_{sl}^{ij} \{kn\} - T_{ks}^{ij} \{ln\} \quad (3.70)$$

A qualificação *covariante* para esse tipo de derivada é justificada pelo fato de ser o resultado dessa diferenciação um tensor com um índice covariante a mais. A derivada covariante de um escalar  $\varphi(x)$  em relação a  $x^i$  é definida simplesmente por  $\varphi_{,i} \equiv \partial\varphi/\partial x^i$ , já que esta derivada parcial é um tensor (um vetor covariante).

Não há dificuldades em se verificar que as regras para a diferenciação covariante de somas e produtos de tensores são as mesmas da diferenciação ordinária.

O *teorema de Ricci*, cuja demonstração não será feita aqui, diz serem nulas as derivadas covariantes do tensor fundamental e dos seus tensores associados:

$$g_{ij,k} = 0 ; \quad g^{ij}_{,k} = 0 ; \quad g^i_{j,k} = 0 \quad (3.71)$$

Pode-se dizer, então, que tais tensores “comportam-se como constantes” sob a diferenciação covariante. Isso justifica, por exemplo, abaixar o índice  $i$  em  $T^i_{j,k}$  como normalmente é feito –  $g_{il}T^i_{j,k} = T_{lj,k}$  –, pois:

$$T^l_{j,k} = (g_{il}T^i_j)_{,k} = T_{ij,k} \quad (3.72)$$

Outro resultado interessante é que os símbolos de Christoffel se anulam num sistema de coordenadas cartesianas: nestas, o tensor métrico é constante [cf. Eq. (3.43)] e a Eq. (3.56) mostra que os símbolos de Christoffel de 1ª espécie devem ser nulos e, por conseguinte, também os de 2ª espécie.

### 3.11 Derivada intrínseca ou absoluta

Considere um vetor  $V^k$  qualquer num certo ponto de uma curva  $C$  dada parametricamente por  $x^k(t)$ . Se em cada ponto da reta tomarmos um vetor paralelo a  $V^k$  e de mesma magnitude então teremos o que chamamos *campo paralelo de vetores ao longo de  $C$* .

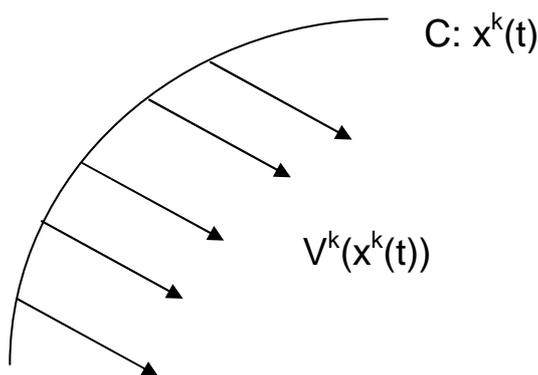


Figura 10. Campo paralelo de vetores ao longo da curva C.

Se for utilizado um sistema de coordenadas cartesianas  $\bar{x}^k$ , os componentes  $\bar{V}^k$  do campo considerado seriam constantes e  $d\bar{V}^k/dt = 0$ . Já num sistema de coordenadas curvilíneas  $x^k$ , os componentes  $V^k$  desse mesmo campo não satisfariam necessariamente uma equação similar  $dV^k/dt = 0$ , pois os componentes em relação a uma base que muda de ponto a ponto (o que caracteriza as coordenadas curvilíneas) certamente variam. Surge assim a questão: em coordenadas genéricas, que equação é satisfeita pelo campo considerado?

Primeiramente, observe que a equação  $d\bar{V}^k/dt = 0$  discutida acima, pode ser assim escrita:

$$0 \doteq \frac{d\bar{V}^k}{dt} = \frac{\partial \bar{V}^k}{\partial \bar{x}^j} \frac{d\bar{x}^j}{dt} \doteq \underbrace{\frac{D\bar{V}^k}{D\bar{x}^j}}_{(*)} \frac{d\bar{x}^j}{dt} \quad (3.73)$$

Em que, na última passagem, usamos o fato de que, em coordenadas cartesianas, a derivada parcial é igual à derivada covariante. O termo marcado por (\*), sendo o produto de dois tensores, é também um tensor, cuja importância garante-lhe nome e notação especial: *derivada intrínseca do vetor  $V^k$  ao longo da curva  $x^k(t)$*  (num sistema genérico de coordenadas), comumente denotada por meio do símbolo  $\delta$  e sendo encontrada na literatura em várias formas equivalentes:

$$\frac{\delta V^k}{\delta t} \equiv \frac{DV^k}{Dx^j} \frac{dx^j}{dt} = \left[ \frac{\partial V^k}{\partial x^j} + \left\{ \begin{matrix} k \\ ij \end{matrix} \right\} V^i \right] \frac{dx^j}{dt} = \frac{dV^k}{dt} + \left\{ \begin{matrix} k \\ ij \end{matrix} \right\} V^i \frac{dx^j}{dt} \quad (3.74)$$

onde substituímos a expressão da derivada covariante de  $V^k$ .

Ora, a Eq. (3.73) diz que  $\delta\bar{V}^k/\delta t = 0$  (derivada intrínseca nula em coordenadas cartesianas); mas, sendo uma equação tensorial, ela vale em qualquer sistema de coordenadas. Reciprocamente, se um campo é tal que  $\delta V^k/\delta t = 0$  ao longo de uma curva, esta equação em coordenadas cartesianas  $\bar{x}^k$  reduz-se à equação  $d\bar{V}^k/dt = 0$ , pela qual concluímos que se trata de um campo paralelo ao longo da curva dada.

Pode-se resumir a resposta ao problema posto como segue: *a derivada intrínseca de um campo  $V^k$  de vetores ao longo da curva  $x^k(t)$  é nula, i.e.,*

$$\frac{\delta V^k}{\delta t} = 0 \quad (3.75)$$

*se e somente se este campo é paralelo ao longo da curva.*

A derivada intrínseca é facilmente estendida ao caso de um tensor genérico; por exemplo, temos que:

$$\frac{\delta T_{kl}^{ij}}{\delta t} \equiv \frac{DT_{kl}^{ij}}{Dx^m} \frac{dx^m}{dt} \quad (3.76)$$

Usando a notação da derivada intrínseca, podemos reescrever a equação da geodésica dada pela Eq.(3.58) como segue:

$$\begin{aligned} \frac{d^2 x^k}{ds^2} + \left\{ \begin{matrix} k \\ ij \end{matrix} \right\} \frac{dx^i}{ds} \frac{dx^j}{ds} &= \frac{d}{ds} \left( \frac{dx^k}{ds} \right) + \left\{ \begin{matrix} k \\ ij \end{matrix} \right\} \frac{dx^i}{ds} \frac{dx^j}{ds} = \frac{dV^k}{ds} + \left\{ \begin{matrix} k \\ ij \end{matrix} \right\} V^i \frac{dx^j}{ds} = \frac{\delta V^k}{\delta s} \\ &= 0 \end{aligned}$$

Em que o vetor  $V^k \equiv dx^k/ds$  é tangente à geodésica e unitário. Portanto, a geodésica é a curva ao longo da qual os vetores unitários tangentes formam um campo paralelo (i.e. apresentam derivada intrínseca nula). No espaço tridimensional euclidiano esse fato é óbvio: as geodésicas são linhas retas, cujos unitários tangentes são claramente paralelos.

A noção de derivada intrínseca permite calcular a derivada de um vetor em relação a um parâmetro; se o vetor caracterizar a velocidade de uma partícula e o parâmetro for um tempo, então se tem definida a noção de aceleração, para qualquer sistema de coordenadas.

As componentes do vetor velocidade são sempre dadas pela derivada das coordenadas, independente do sistema de coordenadas utilizado:

$$v^i \equiv \frac{dx^i}{dt} = \dot{x}^i \quad (3.77)$$

No entanto, a aceleração é dada pela derivada intrínseca da velocidade em relação ao tempo:

$$a^i \equiv \frac{\delta v^i}{\delta t} = v^i_{,j} \frac{dx^j}{dt} = \left[ \frac{\partial v^i}{\partial x^j} + v^k \left\{ \begin{matrix} i \\ jk \end{matrix} \right\} \right] \frac{dx^j}{dt} = \frac{\partial v^i}{\partial x^j} \frac{dx^j}{dt} + \left\{ \begin{matrix} i \\ jk \end{matrix} \right\} \frac{dx^j}{dt} v^k = \frac{dv^i}{dt} + \left\{ \begin{matrix} i \\ jk \end{matrix} \right\} \frac{dx^j}{dt} \frac{dx^k}{dt}$$

$$a^i = \frac{d^2 x^i}{dt^2} + \left\{ \begin{matrix} i \\ jk \end{matrix} \right\} \frac{dx^j}{dt} \frac{dx^k}{dt} \quad (3.78)$$

Essa equação é muito semelhante à Eq. (3.58), da geodésica. Desse modo, pode-se interpretar a equação da geodésica como a equação da trajetória de uma partícula cuja aceleração é nula <sup>52</sup>.

### 3.12 Formas Tensoriais do Gradiente, Divergente, Rotacional e Laplaciano

É apresentada a representação tensorial de algumas expressões vetoriais úteis.

#### (a) Gradiente

Se  $\varphi$  é uma função escalar das coordenadas, então o gradiente de  $\varphi$  é denotado por:

$$(\text{grad}\varphi)_i \equiv \frac{\partial \varphi}{\partial x^i} = \varphi_{,i} \quad (3.79)$$

que é um vetor covariante.

A forma contravariante do gradiente é:

$$g^{im} \varphi_{,m} \quad (3.80)$$

#### (b) Divergente

O divergente de um vetor contravariante  $F^i$  é definido pela seguinte contração de sua derivada covariante:

$$\operatorname{div} F^i \equiv F^i_{,i} = \frac{\partial F^i}{\partial x^i} + F^k \left\{ \begin{matrix} i \\ ki \end{matrix} \right\} \quad (3.81)$$

O divergente do vetor covariante  $F_i$  é definido por:

$$\operatorname{div} F_i = g^{ij} F_{i,j} \quad (3.82)$$

Frequentemente encontramos a seguinte fórmula para a divergência:

$$\operatorname{div} F^i = \frac{1}{\sqrt{g}} \frac{\partial}{\partial x^i} (\sqrt{g} F^i) \quad (3.83)$$

### (c) Rotacional

Seja  $V_i$  um vetor covariante, então:

$$V_{i,j} = \frac{\partial V_i}{\partial x^j} - V_k \left\{ \begin{matrix} k \\ ij \end{matrix} \right\}$$

$$V_{j,i} = \frac{\partial V_j}{\partial x^i} - V_k \left\{ \begin{matrix} k \\ ji \end{matrix} \right\}$$

são tensores covariantes.

Então,  $V_{i,j} - V_{j,i} = \frac{\partial V_i}{\partial x^j} - \frac{\partial V_j}{\partial x^i}$  é um tensor covariante de segunda ordem, que é chamado rotacional de  $V_i$ . Portanto,

$$\operatorname{rot} V_i = V_{i,j} - V_{j,i} \quad (3.84)$$

Note que o rotacional de  $V_i$  é um tensor antissimétrico. Observe, também, que para um vetor *contravariante*, a diferença  $\partial V^i / \partial x^j - \partial V^j / \partial x^i$  de derivadas parciais não é igual à diferença  $V^i_{,j} - V^j_{,i}$  de derivadas covariantes, o que impede a definição tensorial do rotacional de um vetor contravariante.

### (d) Laplaciano

O laplaciano de uma função invariante das coordenadas  $x^i$  é definido como sendo o invariante que se obtém calculando a divergência do gradiente de  $\varphi$ :

$$\nabla^2 \varphi \equiv \operatorname{div}(\operatorname{grad} \varphi)_i$$

Usando o fato de que  $\text{div}F_i = \text{div}F^i$  a Eq. (3.83), obtemos:

$$\nabla^2 \varphi = \frac{1}{\sqrt{g}} \frac{\partial}{\partial x^i} \left[ \sqrt{g} g^{ij} \frac{\partial \varphi}{\partial x^j} \right] \quad (3.85)$$

## Capítulo 4

### DEFEITOS EM CRISTAIS LÍQUIDOS NEMÁTICOS

Neste capítulo é feita uma descrição sucinta da Teoria Elástica do Contínuo (seguindo a referência <sup>53</sup>) visando a análise dos defeitos em cristais líquidos nemáticos. Entre eles será dada maior importância às disclinações axiais, que serão os tipos de defeitos utilizados no estudo da propagação geométrica da luz.

#### 4.1 Teoria Elástica Contínua

Basicamente, há dois grandes modelos teóricos para descrever o comportamento dos cristais líquidos: o modelo microscópico estatístico (de Maier-Saupe)<sup>30</sup>, e um modelo macroscópico, denominado Teoria Elástica do Contínuo<sup>27</sup>. Neste último, o meio é tratado como sendo contínuo e com propriedades elásticas.

Qualquer tentativa de deformar o alinhamento uniforme do diretor numa amostra nemática – o que pode ser feito por meio de forças de ancoramento em superfícies de vidro, campos elétricos e magnéticos etc.–resulta em uma força elástica restauradora. As constantes de proporcionalidade entre as deformações e a tensão restauradora são conhecidas como constantes elásticas. As distorções no campo diretor podem ser descritas por uma densidade de energia livre  $F$ , que será obtida utilizando-se os argumentos a seguir<sup>53</sup>.

O estado de deformação de um nemático é descrito pelo campo diretor  $\mathbf{n}(\mathbf{r})$ , a uma temperatura fixa  $T$ . A energia livre associada com as deformações depende, necessariamente, do gradiente do diretor,  $\nabla\mathbf{n}$ , cujas componentes serão denotadas por  $(\partial n_i / \partial x_j) = n_{i,j}$ . Será assumido que as distorções são pequenas:

$$|n_{i,j}| \ll \frac{1}{a} \quad (4.1)$$

Em que  $a$  é o comprimento molecular típico ( $\sim 20 \text{ \AA}$ ). Esta suposição traz algumas vantagens. Primeiro, na vizinhança de qualquer ponto (exceto nas singularidades) há um cristal líquido *perfeito*, bem definido, com orientação  $\mathbf{n}(\mathbf{r})$ , cuja extensão espacial é grande o suficiente para fazer a descrição *contínua* possível.

Daí, o parâmetro de ordem é uma constante localmente bem definida  $S[T(\mathbf{r})]$ , que só depende unicamente da temperatura.

Segundo, em qualquer ponto  $\mathbf{r}$ , as propriedades de simetria do “crystal líquido perfeito” refletem na sua densidade de energia  $f(\mathbf{r})$ , a qual não depende apenas de  $\mathbf{n}(\mathbf{r})$  mas também de suas derivadas  $\nabla\mathbf{n}$ . É suposto, também, que  $f(\mathbf{r})$  não varie sob qualquer mudança na orientação de  $\mathbf{n}$  e do valor de suas derivadas.

Portanto, a densidade de energia livre de um nemático deve ser invariante sob qualquer transformação que preserve a orientação local de  $\mathbf{n}$ , ou seja:

- (i) Invariância sob a operação  $\mathbf{n} \rightarrow -\mathbf{n}$ ;
- (ii) Inversão central (ou ponto de reflexão) em torno de qualquer ponto;
- (iii) Invariância sob qualquer rotação em torno de  $\mathbf{n}$ .

É suficiente restringir a expansão da densidade de energia livre em termos apenas quadráticos de  $\nabla\mathbf{n}$ , pois  $n_{i,j}$  é muito pequeno.

Os únicos invariantes escalares lineares em  $n_{i,j}$  e invariantes sob qualquer rotação são:  $\text{div}\mathbf{n} = n_{i,i}$  e  $\mathbf{n} \cdot \text{rot}\mathbf{n} = \varepsilon_{ijk}n_{k,j}n_i$ . Aqui,  $\varepsilon_{ijk}$  é um tensor unitário antissimétrico (o tensor de Levi-Civita) com  $\varepsilon_{123} = \varepsilon_{231} = \varepsilon_{312} = 1$ ,  $\varepsilon_{132} = \varepsilon_{213} = \varepsilon_{321} = -1$ ;  $\varepsilon_{ijk}$  é nulo quando qualquer um dos índices é repetido. Em notação indicial, as componentes de um produto vetorial são  $[\mathbf{a} \times \mathbf{b}]_i = \varepsilon_{ijk}a_jb_k$ ; então,  $\text{rot}\mathbf{n} = [\nabla \times \mathbf{n}] = \varepsilon_{ijk}n_{k,j}$ . Como  $\text{div}\mathbf{n}$  é impar em  $\mathbf{n}$ , deve ser excluído da expansão da densidade de energia livre, porém  $(\text{div}\mathbf{n})^2$  é permitido. Finalmente,  $\mathbf{n} \cdot \text{rot}\mathbf{n}$  muda sob inversão de sinal ( $x \rightarrow -x$ ;  $y \rightarrow -y$ ;  $z \rightarrow -z$ ) e não pode aparecer na densidade de energia de um nemático, mas  $(\text{rot}\mathbf{n})^2$  pode.

Como em  $(\text{rot}\mathbf{n})^2 = (\mathbf{n} \cdot \text{rot}\mathbf{n})^2 + (\mathbf{n} \times \text{rot}\mathbf{n})^2$ , ambos os termos do lado direito são invariantes simétricos, a densidade de energia livre, limitada a derivadas de primeira ordem, pode ser escrita como <sup>53</sup>

$$f = \frac{1}{2}K_1(\text{div}\mathbf{n})^2 + \frac{1}{2}K_2(\mathbf{n} \cdot \text{rot}\mathbf{n})^2 + \frac{1}{2}K_3(\mathbf{n} \times \text{rot}\mathbf{n})^2 \quad (4.2)$$

A Eq. (4.2) é referida como a densidade de energia livre de Frank com as constantes elásticas de Frank  $K_1$ ,  $K_2$  e  $K_3$  todas necessariamente positivas. Esta é a fórmula fundamental da teoria contínua para a fase nemática uniaxial.

As três constantes elásticas estão associadas com os três tipos básicos de deformação (Fig. 9): “splay” (divergência),  $\text{div } \mathbf{n} \neq 0$ ; “twist” (torção),  $\mathbf{n} \cdot \text{rot } \mathbf{n} \neq 0$  e “bend”(flexão),  $\mathbf{n} \times \text{rot } \mathbf{n} \neq 0$ .

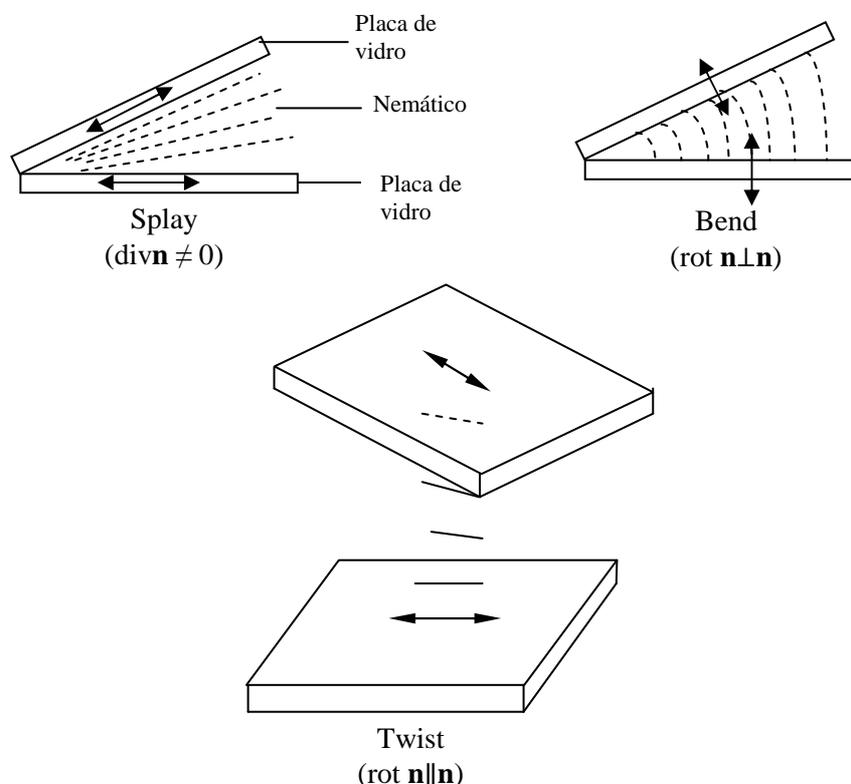


Figura 11. Três tipos de deformação que ocorrem em nemáticos. A figura mostra como cada tipo pode ser obtida separadamente por arranjo adequado das paredes dos vidros<sup>44</sup>.

Uma melhor visualização destas deformações, com figuras “animadas”, pode ser encontrada na referência<sup>54</sup>.

Outros termos podem ser incluídos na Eq. (4.2) como o “saddle-splay”, que descreve a interação com a superfície, e o “splay-bend”, que se obtém quando se considera a dependência da densidade de energia livre com as segundas derivadas espaciais do diretor<sup>47</sup>.

A energia elástica total de uma amostra de cristal líquido é obtida integrando a densidade de energia elástica sobre todo o volume da amostra:

$$F = \int f(n_i, n_{i,j}) dV \quad (4.3)$$

em que  $f$  é dado pela Eq. (4.2) com a possibilidade de adição de termos de campos ou de superfície. O problema de minimização<sup>55</sup> consiste em procurar por uma distribuição do diretor  $\mathbf{n}(\mathbf{r})$  a qual minimiza  $F_{\text{sob}}$  vínculos físicos, tais como orientação do diretor devido à superfície, forma da amostra etc.

Considere uma variação *arbitrária*  $\delta\mathbf{n}(\mathbf{r})$  tal que  $\mathbf{n}' = \mathbf{n}(\mathbf{r}) + \delta\mathbf{n}(\mathbf{r})$  produz uma maior energia livre  $F'$ . O método consiste, portanto, em calcular  $\delta F = F' - F$ :

$$\delta F = \int \left[ \frac{\partial f}{\partial n_i} \delta n_i + \frac{\partial f}{\partial n_{i,j}} \delta n_{i,j} \right] dV = \int \left[ \frac{\partial f}{\partial n_i} \delta n_i - \delta n_i \frac{\partial}{\partial x_j} \frac{\partial f}{\partial n_{i,j}} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left( \frac{\partial f}{\partial n_{i,j}} \delta n_i \right) \right] dV \quad (4.4)$$

em que foi usado a regra do produto:

$$\frac{\partial}{\partial x_j} \left( \frac{\partial f}{\partial n_{i,j}} \delta n_i \right) = \delta n_i \frac{\partial}{\partial x_j} \frac{\partial f}{\partial n_{i,j}} + \frac{\partial f}{\partial n_{i,j}} \frac{\partial}{\partial x_j} (\delta n_i)$$

e escrever  $\delta F = 0$  para qualquer escolha de  $\delta\mathbf{n}(\mathbf{r})$ . O último termo no integrando da Eq. (4.4) pode ser transformado, por integração por partes, em uma integral de superfície e somente entra nas condições de contorno:

$$\delta F = \int \left[ \frac{\partial f}{\partial n_i} - \frac{\partial}{\partial x_j} \frac{\partial f}{\partial n_{i,j}} \right] \delta n_i dV + \int \frac{\partial f}{\partial n_{i,j}} \delta n_i dA_j \quad (4.5)$$

Então, chega-se à equação de Euler-Lagrange<sup>55</sup>:

$$\frac{\partial}{\partial x_j} \frac{\partial f}{\partial n_{i,j}} - \frac{\partial f}{\partial n_i} + \gamma n_i = 0 \quad (4.6)$$

Em que  $\gamma$  é um multiplicador de Lagrange, a ser determinado de modo que a relação  $\mathbf{n}^2 = 1$  seja satisfeita. A Eq. (4.6) é utilizada para deformações estáticas e suas soluções fornecem a configuração do diretor para tais deformações<sup>1</sup>.

## 4.2 Defeitos em Nemáticos

Foi visto que o campo diretor é um campo contínuo que descreve a orientação do sistema líquido cristalino em cada ponto. As distorções apresentadas na seção anterior são variações contínuas do diretor, sem singularidades. Distorções de  $\mathbf{n}$  com singularidades (i.e.,  $\mathbf{n}$  não está unicamente definido) são chamadas *defeitos*. Eles podem aparecer por razões topológicas, energéticas ou dinâmicas<sup>56</sup>;

mas, usualmente, aparecem pela quebra de simetria durante a transição isotrópico-nemático. Para meios tridimensionais, as regiões singulares podem ser adimensionais (pontos), unidimensionais (linhas) e bidimensionais (paredes). Quando um estado não-homogêneo não pode surgir de um estado homogêneo, ele é chamado *topologicamente estável*, ou simplesmente, um *defeito topológico*<sup>53</sup>.

Particularmente, em cristais líquidos nemáticos uniaxiais, são observados defeitos pontuais chamados *hedgehog*, e de linha, chamados *disclinações* (Fig. 10). Defeitos do tipo “parede”, em nemáticos, são completamente instáveis e não serão tratados aqui<sup>44</sup>.

Disclinações em nemáticos tem sido comparados com “cordas cósmicas”, uma vez que foi mostrado experimentalmente<sup>7</sup> que sua formação obedece ao mecanismo de Kibble<sup>57</sup>, originalmente usado para explicar o nascimento de cordas cósmicas. Assim, os cristais líquidos com defeitos tem sido utilizados como laboratório para Gravitação e Cosmologia<sup>8; 58</sup>.

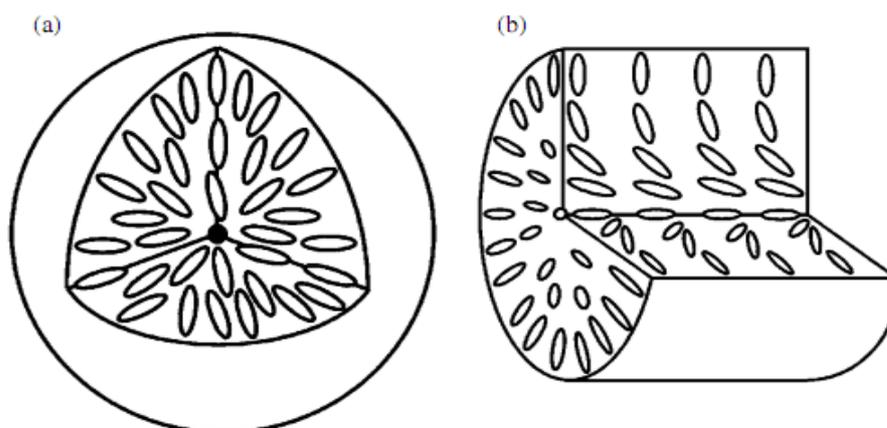


Figura 12. Nemáticos em uma geometria confinada. (a) Configuração radial do diretor, caracterizando um defeito pontual ou *hedgehog*, cuja singularidade se encontra no centro. (b) Configuração do diretor mostrando um defeito de linha, chamado disclinação. A linha da disclinação é coincidente com o eixo do cilindro que delimita a amostra<sup>56</sup>.

#### 4.2.1 Disclinações

Este tipo de defeito é visualizado em filmes de cristais líquidos nemáticos entre polarizadores cruzados, as chamadas *texturas Schlieren*<sup>44</sup> (Fig. 13). Essa

estrutura em “fios” (do grego, “nema”) é responsável pelo nome “nemático”, dado por Friedel.

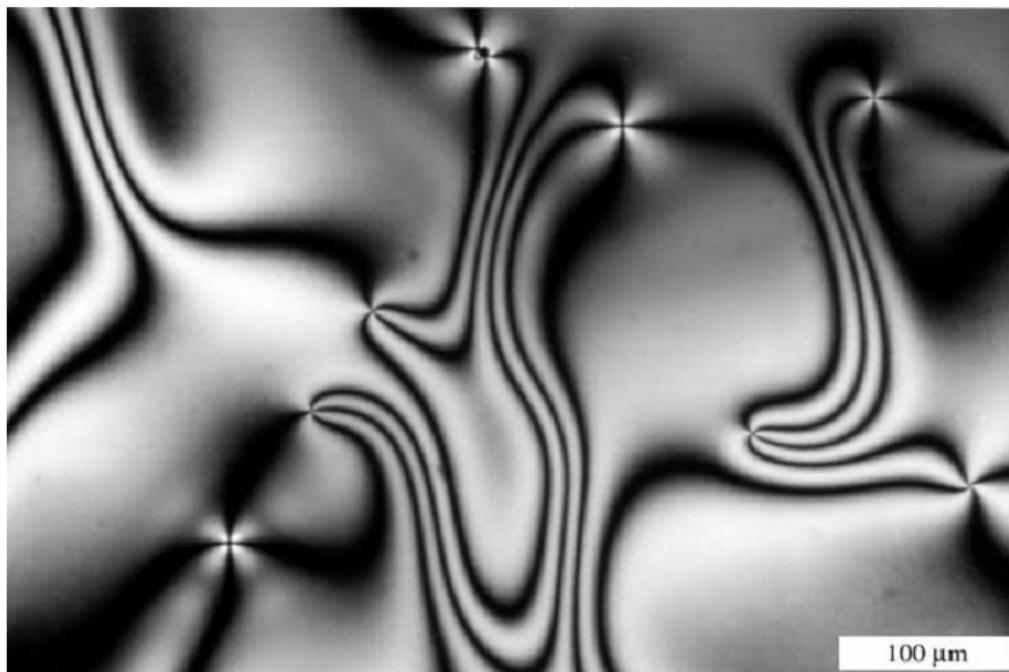


Figura 13. Textura Schlieren de um filme fino ( $\approx 1\mu\text{m}$ ) do nemático 5CB. Os fios escuros marcam as regiões nas quais o diretor é paralelo ao polarizador ou ao analisador. Os pontos onde os fios escuros convergem são o centro dos defeitos topológicos<sup>53</sup>.

Na textura Schlieren vê-se regiões escuras, semelhantes a fios, que se conectam em um ponto. Nessas regiões, o diretor é ou paralelo ou perpendicular ao plano de polarização da luz incidente a qual não é modificada e, portanto, é extinta pelo analisador cruzado. Os centros, para os quais os fios escuros convergem, são as disclinações, ou, mais especificamente, um ponto da linha de disclinação. Alguns centros possuem dois fios escuros “saindo” dele, enquanto que outros possuem quatro.

Quando um dos polarizadores é rotacionado, os centros permanecem estáticos, porém, os fios parecem rotacionar conjuntamente. E o sentido da rotação, ainda, pode ser o mesmo do polarizador (disclinações *positivas*) ou contrário (disclinações *negativas*).

A *magnitude (strength)*, ou intensidade, da disclinação é, então, definida como  $k = \frac{1}{4}(\text{númerodefios})$ . Somente disclinações de magnitude  $k = +\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}, +1$  e  $-1$  são geralmente observadas, porém, defeitos de magnitude  $\pm\frac{3}{2}$  e  $\pm 2$  já foram reportados<sup>59</sup>.

Basicamente há dois tipos de disclinações: as disclinações axiais (ou disclinações *wedge*), e disclinações perpendiculares (ou disclinações *twist*). As disclinações axiais são assim denominadas por que a linha de disclinação é paralela ao eixo de rotação de  $\mathbf{n}$  exigida para se formar uma disclinação. Disclinações perpendiculares são aquelas em que a linha de disclinação é perpendicular ao eixo de rotação do diretor. As trajetórias da luz neste trabalho serão plotadas utilizando disclinações axiais.

Para analisar disclinações axiais será considerado que a linha de disclinação está ao longo do eixo  $z$  e o diretor sempre está paralelo ao plano  $xy$ . Assim, a configuração do diretor, em coordenada cartesianas, será:

$$\vec{n} = (\cos \varphi, \sin \varphi, 0), \quad \varphi = \varphi(x, y) \quad (4.7)$$

E será assumido que o meio é elasticamente isotrópico, i.e,  $K_1 = K_2 = K_3 = K$ , as Eq. (4.2) e (4.6) se reduzem, respectivamente, a (veja Apêndice C):

$$f = \frac{1}{2}K(\nabla\varphi)^2 \quad (4.8)$$

$$\nabla^2\varphi = 0 \quad (4.9)$$

Cabem aqui algumas considerações a respeito do que está sendo feito. Ao ser assumido que as constantes elásticas de Frank são iguais o que se pretende é facilitar os cálculos, diminuindo a complexidade do sistema. Entretanto, esta aproximação concorda com a experiência, já que a razão entre as constantes elásticas são aproximadamente a unidade<sup>44</sup>.

Uma das soluções da Eq. (4.9) é a solução trivial,  $\varphi = 0$ , que não nos interessa. Outra é

$$\boxed{\varphi = k\theta + c} \quad (4.10)$$

Em que  $\theta = \arctg(y/x)$  e  $c$  é uma constante. A constante  $k$  é a magnitude da disclinação. Esta equação descreve a configuração do diretor ao redor da

disclinação (Fig.14). A linha de disclinação está ao longo do eixo z. Na Figura 15, foram plotadas várias configurações do diretor para disclinações axiais.

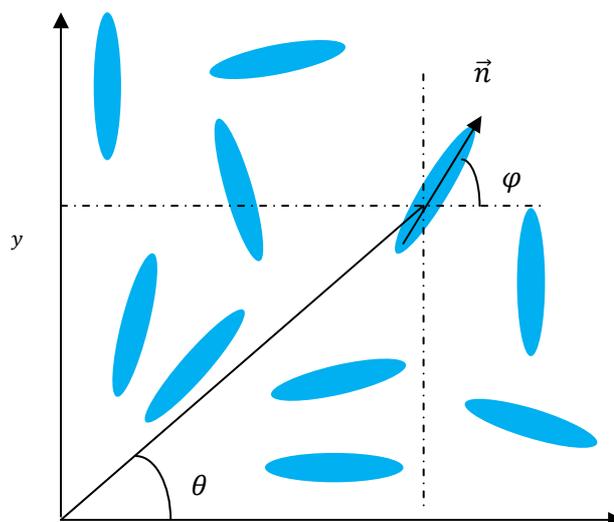


Figura 14. Orientação do diretor ao redor de uma disclinação. Podem ser usadas coordenadas cartesianas  $(x, y)$  ou polares  $(r, \theta)$  para especificá-la. O diretor faz um ângulo  $\varphi$  com o eixo  $x$  e somente depende do ângulo azimutal  $\theta$ .

Para disclinações perpendiculares, considera-se que o diretor é paralelo ao plano  $xy$  e a linha de disclinação está ao longo do eixo  $y$ . A configuração do diretor é:

$$\vec{n} = (\cos \varphi, \sin \varphi, 0), \quad \varphi = \varphi(x, z) \quad (4.11)$$

Em que:

$$\varphi = k \arctg(z/x) + c \quad (4.12)$$

Exemplos de configuração do diretor para disclinações perpendiculares podem ser visualizados na Figura 16. Pode-se, por exemplo e a título de informação, estudar a trajetória da luz tanto paralela como perpendicularmente ao eixo  $z$  para este tipo de defeito, o que não é feito neste trabalho.

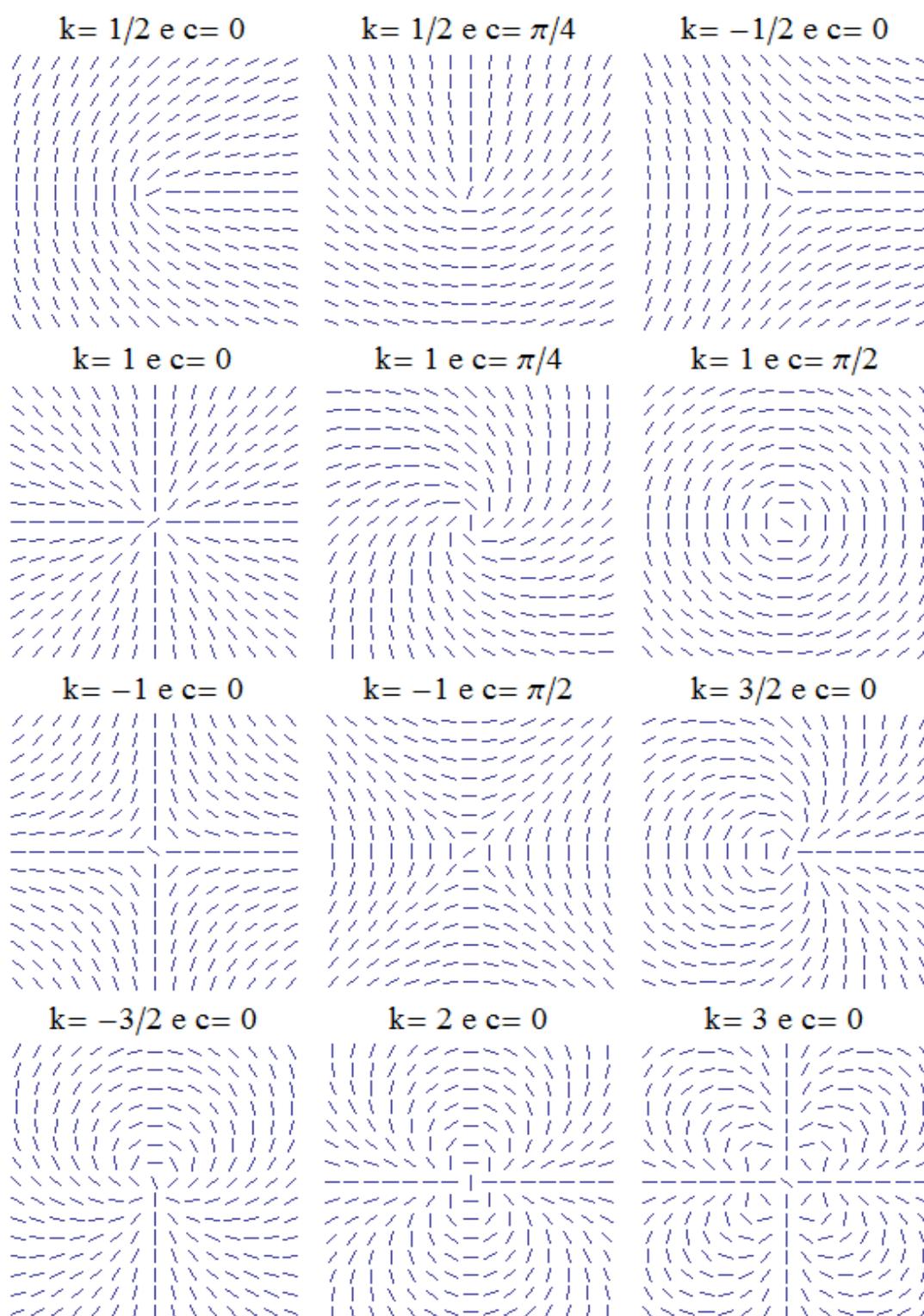


Figura 15. Orientação molecular na vizinhança de uma disclinação. Note que, com exceção de  $k = 1$ , variar a constante  $c$  apenas produz uma rotação na configuração. Essas figuras foram plotadas no *Mathematica*® e os comandos utilizados encontram-se no Apêndice.

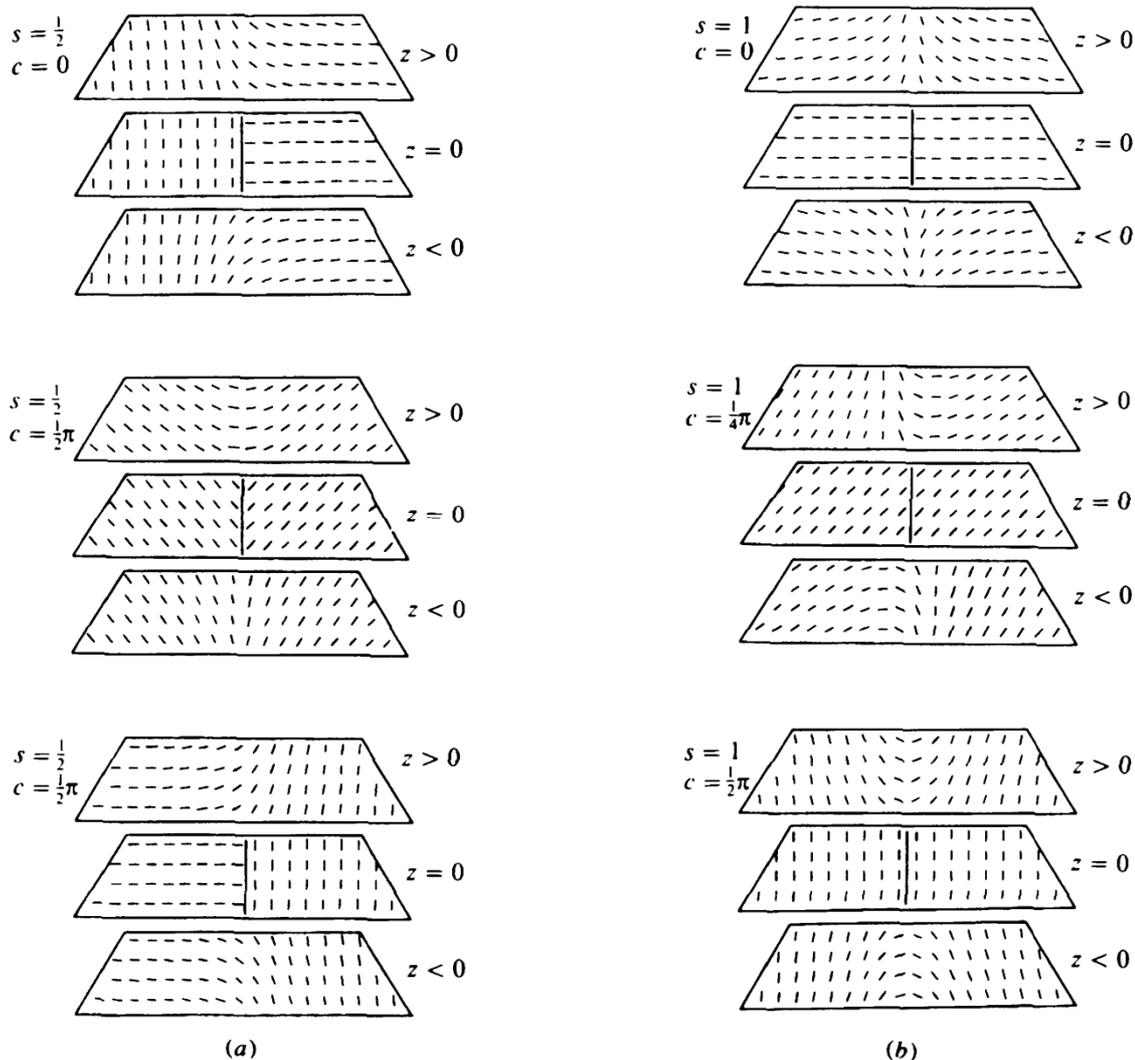


Figura 16. Disclinações perpendiculares: configuração do diretor para (a)  $s (=k) = 1/2$ ,  $c = 0, \pi/4$  e  $\pi/2$ ; e (b)  $s = 1$ ,  $c = 0, \pi/4$  e  $\pi/2$ . Em cada caso, a linha de disclinação é mostrada como uma linha cheia no meio do plano  $z = 0$ . As figuras para  $(s, c)$  e  $(-s, -c)$  são imagens espelhadas uma da outra<sup>1</sup>.

Obviamente as configurações reais do diretor não são exatamente como descritas na Figura 13, pois as moléculas sofrem continuamente perturbação térmica. É interessante também visualizar como essa configuração produz as regiões escuras na amostra quando vistas sob um polarizador. As próximas figuras exemplificam bem o que foi dito neste parágrafo.

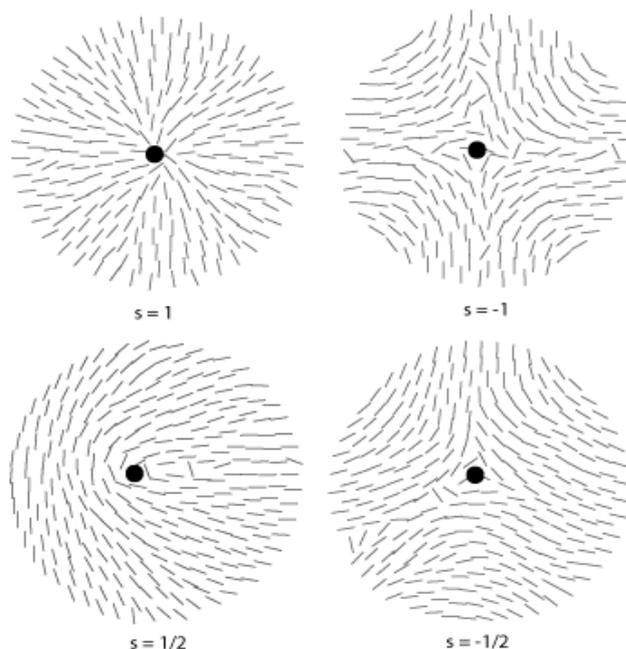


Figura 17. Representação mais realística da configuração do diretor para algumas disclinações. Os pontos estão indicando a linha de disclinação. Compare com a figura 15.

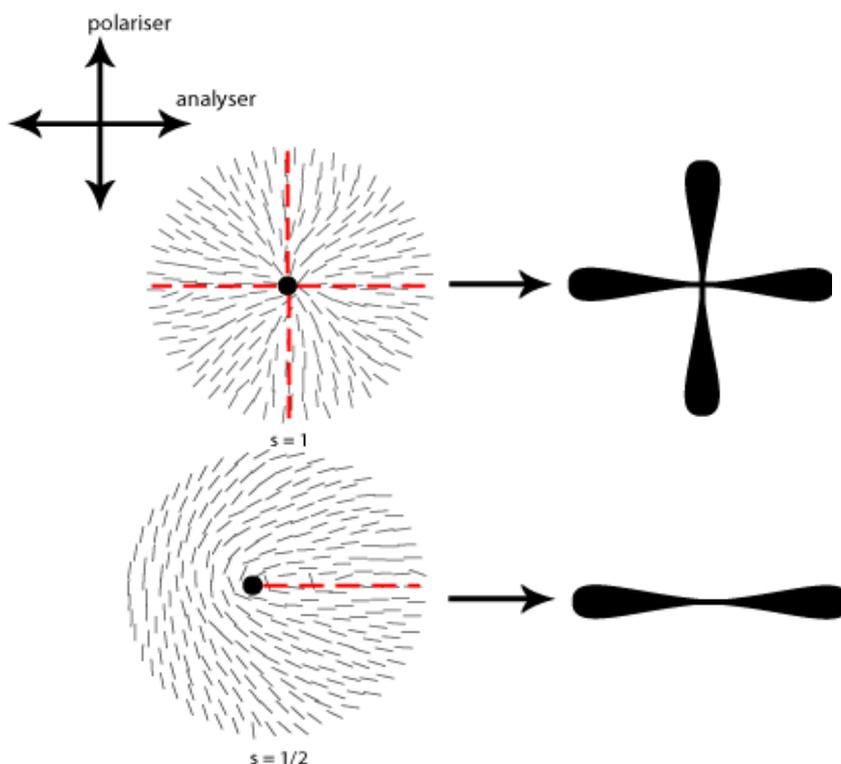


Figura 18. Conexão entre a configuração do diretor ao redor de uma disclinação e as regiões escuras observadas sob um microscópio de luz polarizada. As regiões escuras são aquelas em que o diretor está paralela ao analisador ou ao polarizador. Quando um dos polarizadores é rotacionado essas regiões também rotacionam no mesmo sentido (sinal positivo) ou em sentido contrário (sinal negativo).

### 4.2.2 Defeito Pontual

Defeitos pontuais podem ocorrer em uma configuração radial esfericamente simétrica, chamados “hedgehog”, em que o diretor é normal à superfície (Fig. 10); ou numa estrutura bipolar, com o diretor tangencial à superfície. Os defeitos pontuais ocorrem no estado de equilíbrio dessas partículas devido a condições de contorno ou restrições topológicas<sup>60</sup>.

Para obter suas expressões matemáticas que determinam a configuração do diretor em torno do defeito, primeiramente define-se:

$$\vec{n} = (\cos \varphi \sin \theta, \sin \varphi \sin \theta, \cos \theta), \quad \varphi = \varphi(\alpha) e \theta = \theta(\delta) \quad (4.13)$$

E utilizando a aproximação para as constantes elásticas ( $k_1 = k_2 = k_3 = k$ ) obtém-se<sup>1; 60; 61</sup>,

$$\varphi = k\theta + c e \tan\left(\frac{\theta}{2}\right) = \left[\tan\left(\frac{\delta}{2}\right)\right]^{|k|} \quad (4.14)$$

A Figura 19 dá a configuração do diretor para alguns casos típicos.

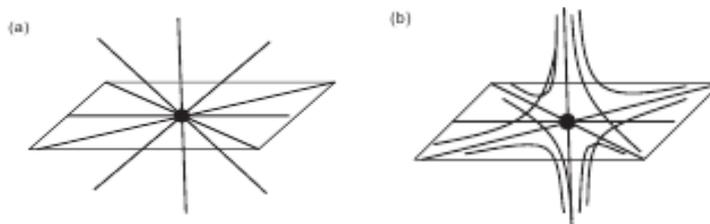


Figura 19. Campo diretor ao redor de pontos singulares. (a)  $s = +1$  e  $c = 0$ . (b)  $s = -1$  e  $c = \pi$ <sup>53</sup>.

## Capítulo 5

### A TRAJETÓRIA DA LUZ EM NEMÁTICOS COM DEFEITOS

Neste capítulo são apresentados os resultados obtidos no estudo da propagação da luz em nemáticos com defeitos, utilizando a métrica dos cristais líquidos nemáticos proposta por Simões *et al*, bem como é feita uma comparação entre os resultados aqui apresentados e os existentes na literatura.

#### 5.1 A Propagação da Luz em Meios Anisotrópicos

A importância das propriedades eletro-ópticas dos cristais líquidos é evidenciada pelas inúmeras aplicações tecnológicas - de “displays” de cristais líquidos (LCD) a janelas inteligentes - com base nessas propriedades<sup>2; 3</sup>. A maioria destas utiliza as características ondulatórias da luz. Porém, o comportamento geométrico da luz (em que o caráter ondulatório é ignorado) também é estudado e útil para aplicações tecnológicas<sup>62; 63</sup>. As considerações físicas a respeito dessa aproximação geométrica são dadas a seguir.

O campo eletromagnético associado com a propagação da luz visível é caracterizado por rápidas oscilações, com frequências da ordem de  $10^{15} \text{ s}^{-1}$ , segue que a luz possui comprimentos de onda da ordem de  $10^{-5} \text{ cm}$ . Pode-se, portanto, esperar que uma boa primeira aproximação para as leis de propagação seja obtida negligenciando completamente o comprimento de onda. Nesta aproximação as leis da óptica podem ser formuladas na linguagem da geometria. A energia pode ser então considerada como sendo transportada ao longo de certas curvas: os raios de luz<sup>64</sup>.

O estudo da propagação geométrica da luz é um assunto antigo. Grandjean<sup>65</sup> já tinha calculado, em 1919, a trajetória dos raios extraordinários da luz e sua respectiva deflexão por linhas de disclinação. Joets e Ribotta, mais recentemente, usaram um modelo geométrico para descrever a propagação da luz em meios anisotrópicos e não-homogêneos como os cristais líquidos<sup>13</sup>. Baseados neste último,

Sátiro e Moraes<sup>14; 15</sup> estudaram a propagação da luz em torno de defeitos topológicos. Estes dois últimos artigos serviram de referência para este trabalho, para efeito de comparação.

O que Sátiro e Moraes fizeram foi identificar o princípio de Fermat, associado com um índice de refração efetivo (o qual é dado em termos dos raios ordinários e extraordinários), com o princípio variacional geodésico para obter uma métrica para cada defeito estudado. As trajetórias da luz foram então obtidas através da equação da geodésica.

Entretanto, a métrica é obtida de maneira *ad hoc*, e não há a possibilidade de usá-la em outras situações envolvendo cristais líquidos nemáticos. É neste ponto que este estudo se diferencia do deles: será usada uma métrica geral para os cristais líquidos nemáticos e que leva em conta as características das moléculas. Na próxima seção será mostrado como a métrica aqui utilizada foi obtida.

## 5.2 A Métrica dos Cristais Líquidos Nemáticos

No trabalho de 2007<sup>17</sup>, Simões *et al* obteve uma métrica para os cristais líquidos nemáticos, em um estudo sobre as constantes elásticas dos mesmos. A seguir, será feita uma breve descrição dos “passos” a serem seguidos para a obtenção de tal métrica.

Parte-se do chamado princípio de Hess<sup>16</sup> que propõe que as propriedades anisotrópicas dos cristais líquidos podem ser obtidas por meio de uma transformação afim\* do potencial esférico de interação de um líquido isotrópico, constituído por moléculas esféricas. Deforma-se os potenciais esféricos dessas moléculas para que assumam a forma elipsoidal do potencial de interação das moléculas de cristais líquidos nemáticos, constituído por moléculas elipsoidais. Matematicamente, isso pode ser escrito como

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

em que  $\Phi$  representa o potencial de interação das moléculas, e os índices E e S são usadas para indicar as simetrias elipsoidais e esféricas, respectivamente. A relação acima é satisfeita se a distância entre dois pontos é dada por uma métrica na qual dois pontos numa superfície equipotencial não esférica torna-se equidistante do

centro do potencial (já que é isso que acontece em uma superfície equipotencial de um potencial esférico). Isto é, a medida das distâncias nos dois potenciais devem ser conectadas pelas seguintes relações

$$r_S^i = \frac{dr_S^i}{dr_E^k} r_E^k e \frac{d}{dr_S^j} = \frac{dr_E^i}{dr_S^j} \frac{d}{dr_E^i} \quad (5.2)$$

Que são as leis de transformação para vetores e para derivadas, respectivamente. É assumida a convenção de Einstein para índices repetidos.

Porém, como em uma amostra nemática a configuração do diretor não é homogeneamente alinhada, mudando de ponto a ponto, a transformação afim necessária para deformar os potenciais torna-se dependente da posição. Isso faz com que um vetor não se comporte como um tensor e uma nova definição de derivada deve ser obtida: a derivada normal deve ser trocada pela derivada covariante.

A passagem do potencial esférico para o potencial elipsoidal pode ser realizado através da mudança da métrica na superfície na qual o fenômeno está sendo estudado. Essa métrica é gerada pela textura dos nemáticos. Para obtê-la, é conveniente lembrar que a distância em uma geometria esférica é dada por

$$d_S^2 = \delta_{ij} r_S^i r_S^j \quad (5.3)$$

Enquanto que em uma geometria não esférica, a distância é

$$d_E^2 = g_{ij} r_E^i r_E^j \quad (5.4)$$

Desse modo, a hipótese de Hess pode ser formulada matematicamente como

$$d^2 \equiv d_S^2 = d_E^2 \quad (5.5)$$

A relação acima conecta o potencial de simetria elipsoidal com o potencial de simetria esférica. Ela nos diz que a medida das distâncias nos dois potenciais deve ser conectada por alguma lei determinada por (5.2).

Pode-se obter uma relação formal entre a métrica  $g_{ij}$  e a transformação do sistema de coordenadas substituindo, na Eq. (5.1), as Eqs. (5.3) e (5.4), e por meio da (5.2), obtém-se

$$\delta_{ij} r_S^i r_S^j = \delta_{ij} \frac{dr_S^i}{dr_E^k} \frac{dr_S^j}{dr_E^l} r_E^k r_E^l \quad (5.6)$$

Daí,

$$g_{kl} = \frac{dr_S^i}{dr_E^k} \frac{dr_S^j}{dr_E^l} \delta_{ij} \quad (5.7)$$

O uso dos índices superiores e inferiores segue a regra usual de vetores contravariantes e covariantes. Essa métrica deve depender dos parâmetros nemáticos que caracterizam a anisotropia da amostra. Então, assume-se que a métrica  $g_{ij}$  seja determinada pela matriz  $E_{ij}$  que caracteriza a forma quadrática de um elipsoide uniaxial.

Para obter tal relação, considere um elipsoide descrito por

$$\frac{x_1^2}{a^2} + \frac{x_2^2}{b^2} + \frac{x_3^2}{b^2} = 1 \quad (5.8)$$

em que  $x_1$ ,  $x_2$  e  $x_3$  são as coordenadas em um sistema de coordenadas ortogonal, este também pode ser escrito como  $E_{ij}^d x^i x^j = 1$ , em que

$$E_{ij}^d = \begin{pmatrix} \frac{1}{a^2} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{b^2} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{b^2} \end{pmatrix} \quad (5.9)$$

é a matriz diagonal que caracteriza o elipsoide, que é completamente caracterizado pelos autovalores

$$\left\{ \frac{1}{a^2}, \frac{1}{b^2}, \frac{1}{b^2} \right\} \quad (5.10)$$

E autovetores  $\{\vec{e}_x, \vec{e}_y, \vec{e}_z\}$ . O índice  $d$  é usado em  $E_{ij}^d$  para indicar que a matriz correspondente é diagonal.

A matriz  $E_{ij}$  representando um elipsoide uniaxial arbitrário com semi-eixos principais com mesmos comprimentos do elipsoide caracterizado pela matriz  $E_{ij}^d$ , pode ser obtida a partir desta última através de uma rotação arbitrária na qual os

três eixos principais ortonormais  $\{\vec{e}_x, \vec{e}_y, \vec{e}_z\}$  são rigidamente rotacionados para um novo sistema ortonormal  $\{\vec{p}, \vec{q}, \vec{r}\}$ . Após tal rotação,  $E_{ij}$  assume a forma

$$E_{ij} = \frac{1}{a^2} p_i p_j + \frac{1}{b^2} q_i q_j + \frac{1}{b^2} r_i r_j \quad (5.11)$$

Mostra-se facilmente que  $\vec{p}, \vec{q}, \vec{r}$  são os autovetores normalizados de  $E_{ij}$  e  $\{1/a^2, 1/b^2, 1/b^2\}$  são os respectivos autovalores. Uma importante propriedade desses autovetores é que eles compõem um conjunto completo e portanto estão conectados por

$$p_i p_j + q_i q_j + r_i r_j = \delta_{ij} \quad (5.12)$$

Combinando (5.12) com (5.11), obtém-se

$$E_{ij} = \frac{1}{a^2} p_i p_j + \frac{1}{b^2} (\delta_{ij} - p_i p_j) = \frac{1}{1-e} \{\delta_{ij} - e p_i p_j\} \quad (5.13)$$

em que

$$e = 1 - b^2 \quad (5.14)$$

é a excentricidade do elipsoide e  $\vec{p}$  corresponde ao eixo principal de simetria do elipsoide uniaxial. Foi fixado o comprimento do semi-eixo principal do elipsoide como  $a = 1$ , de modo que a concordar com a normalização adotada para a esfera  $r = 1$ . Então, em uma rotação arbitrária do sistema de coordenadas, este elipsoide pode ser escrito como

$$E_{ij} y^i y^j = 1 \quad (5.15)$$

No limite em que a excentricidade  $e$  vai a zero o elipsoide  $E_{ij}$  reduz-se a uma esfera de raio  $r = 1$ . Daí, deduz-se que a anisotropia da amostra pode ser quantificada medindo quanto o elipsoide difere de sua esfera equivalente. Tal esfera equivalente pode ser obtida lembrando que, de acordo com (5.9), a matriz que caracteriza o elipsoide é uma função linear dos inversos dos quadrados dos seus eixos e seria reduzida a uma esfera de seus eixos se tornassem iguais. O raio da esfera equivalente deve, então, satisfazer a relação,

$$\frac{1}{r^2} = \frac{1}{3} Tr(E) = \frac{1}{1-e} \left(1 - \frac{e}{3}\right) \quad (5.16)$$

Isto é, o inverso do quadrado do raio da esfera equivalente é dado pela média do inverso do quadrado dos semi-eixos do elipsoide. Assim, se  $E$  é a matriz que caracteriza um elipsoide, os elementos da matriz que caracteriza a esfera equivalente serão:

$$S_{ij} = \frac{1}{3} \delta_{ij} Tr(E) \quad (5.17)$$

Conseqüentemente, a deformação elipsoidal  $\Delta E$  será definida pela diferença entre o elipsoide e a esfera equivalente,

$$\Delta E_{ij} = E_{ij} - S_{ij} = E_{ij} - \frac{1}{3} \delta_{ij} Tr(E) \quad (5.18)$$

O qual, com o uso de (5.13) e (5.16) torna-se:

$$\Delta E_{ij} = \frac{e}{1-e} \left\{ \frac{1}{3} \delta_{ij} - p_i p_j \right\} \quad (5.19)$$

Isto é, a deformação elipsoidal  $\Delta E$  é determinada pelo produto de dois termos distintos:  $e/(1-e)$ , e

$$Q_{ij}^E = \frac{1}{3} \delta_{ij} - p_i p_j \quad (5.20)$$

Este último termo é o componente anisotrópico da deformação elipsoidal. Ele coincide com o tensor de momento quadrupolo <sup>66</sup>, sendo formalmente similar ao parâmetro de ordem tensorial [Eq. (2.3)] de um cristal líquido nemático. Na equação (5.19), o termo de excentricidade,  $e$ , fornece a magnitude da alongação elipsoidal; diferentes excentricidades correspondem a diferentes formas moleculares: quando  $e < 0$ , temos que  $b > 1$ , correspondendo à fase discótica e quando  $e > 0$ , temos  $b < 1$ , correspondendo à fase calamítica.

Resumindo, a matriz elipsoidal, dada por (5.11), pode ser escrita como:

$$E_{ij} = S_{ij} + \frac{e}{b^2} Q_{ij}^E = \frac{e}{1-e} \left\{ \left(1 - \frac{e}{3}\right) \delta_{ij} + e Q_{ij}^E \right\} \quad (5.21)$$

Em que o primeiro termo corresponde à parte esférica (isotrópica) de  $E_{ij}$  e o segundo termo descreve o seu desvio de uma forma esférica. Tal desvio é descrito por um termo que é estruturalmente idêntico ao parâmetro de ordem tensorial. É importante ressaltar que esta similaridade, até agora, é puramente formal, pois

conceitualmente descrevem objetos diferentes. Esse é o motivo do sobrescrito  $E$  em  $Q_{ij}^E$ . O próximo, e último passo, para obtenção da métrica  $g_{ij}$  é aprimorar tal igualdade até o ponto em que ambos os conceitos se tornem idênticos e uma métrica dependente da temperatura seja obtida.

A métrica deve depender da temperatura por uma motivação física simples: para temperaturas maiores que o ponto de transição NI o líquido nemático é isotrópico e todas as direções são equivalentes, para temperaturas menores que o ponto de transição NI o líquido torna-se anisotrópico e em cada ponto as propriedades físicas adquirem direção privilegiada.

A anisotropia dos materiais líquido-cristalinos pode ser observada em dois níveis: microscopicamente e macroscopicamente. As moléculas de cristal líquido possuem uma anisotropia microscópica intrínseca, que quando calculadas em média, podem ou não ser observadas macroscopicamente, dependendo da temperatura. Fazendo a distinção entre a natureza microscópica e macroscópica de  $Q_{ij}$  denotamos por  $Q_{ij}(\hat{n})$  o parâmetro de ordem microscópico associado à variável aleatória  $\hat{n}$ , que nos dá a direção do eixo molecular longo. De maneira análoga, denotamos por  $Q_{ij}(n)$  o parâmetro de ordem macroscópico, em que  $n$  é o diretor usual. A conexão entre essas duas quantidades é feita assumindo que a variável aleatória microscópica  $\hat{n}$  oscila tão rápido que quando uma média de  $Q_{ij}(\hat{n})$  é feita, no tempo e/ou nas vizinhanças de um ponto, obtemos  $Q_{ij}(n)$  e este possui a mesma forma como dada na Eq. (5.20), com  $\hat{n}$  recolocado por  $n$ . Matematicamente, tem-se

$$\langle Q_{ij}(\hat{n}) \rangle = S Q_{ij}(n) \quad (5.22)$$

Em que  $S$  é o parâmetro de ordem escalar e dá a intensidade com que as oscilações aleatórias fazem a anisotropia microscópica ser observada na escala macroscópica. Multiplicando a equação (5.22) por  $Q^{ij}(n)$  e tomando o traço da expressão resultante, recupera-se a expressão do parâmetro de ordem escalar [Eq. (2.2)].

Considere agora que o potencial interagente atribuído a cada molécula de uma amostra nemática tem uma superfície equipotencial que pode ser representado pela matriz  $E_{ij}$ . Supondo que se possa estender tal ideia para a vizinhança de um ponto, para uma grande quantidade de moléculas, em analogia com (5.22), pode-se ter moléculas alinhadas gerando uma fase nemática ou desalinhadas. A

representação dos resultados macroscópicos deste alinhamento microscópico pode ser feito através da matriz  $Q_{ij}^E$ , assumindo que ela satisfaz a mesma relação de um parâmetro de ordem microscópico,

$$\langle Q_{ij}^E(\hat{n}) \rangle = SQ_{ij}(n) \quad (5.23)$$

Isso significa que a anisotropia de cada molécula torna-se acoplada com a anisotropia microscópica da vizinhança, fazendo com que o eixo longo de cada molécula oscile ao longo da mesma direção, gerando a fase nemática. Como consequência, o raciocínio acima fornece resultados macroscópicos para a anisotropia elipsoidal microscópica de cada molécula nemática. Como  $Q_{ij}^E$  aparece na definição de  $E_{ij}$ , a Eq. (5.21) revela que a matriz elipsoidal  $E_{ij}$  também contém um complemento macroscópico, pois, uma vez atribuído significado a  $\langle Q_{ij}^E \rangle$ , deve-se atribuir um significado correspondente a  $\langle E_{ij} \rangle$ . Tal matriz mede a passagem de uma simetria isotrópica macroscópica, determinada por  $\delta_{ij}$ , para uma simetria macroscópica elipsoidal de uma fase nemática. Assumindo que tal anisotropia é percebida através da métrica macroscópica  $g_{ij}$ , isto é,  $g_{ij} = N\langle E_{ij} \rangle$ , tem-se,

$$g_{ij} = N \left\{ \frac{1}{3} \text{Tr}(E) \delta_{ij} + \frac{e}{1-e} \langle Q_{ij}(\hat{n}) \rangle \right\} = \frac{N}{(1-e)} \left\{ \left(1 - \frac{e}{3}\right) \delta_{ij} + eSQ_{ij}(n) \right\} \quad (5.24)$$

Em que N é uma constante de normalização introduzida para assegurar a normalização do diretor,

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

Um cálculo direto revela o valor de N, mostrando que,

$$g_{ij} = \frac{1}{[3-e(1+2S)]} \left\{ (3-e)\delta_{ij} + 3eSQ_{ij}(n) \right\} \quad (5.25)$$

$$g^{ij} = \frac{1}{[3-e(S-1)]} \left\{ [3-e(S+1)]\delta^{ij} + 3eSQ^{ij}(n) \right\} \quad (5.26)$$

Nessas equações assume-se que a métrica induzida pela anisotropia elipsoidal depende do parâmetro de ordem escalar S e, portanto, é macroscópica, sendo determinada pela temperatura nemática. Na fase isotrópica,  $S = 0$ , a métrica é esférica e macroscópica. Quando a temperatura é reduzida, a transição de fase NI

cria um  $S$  não nulo, induzindo uma anisotropia elipsoidal macroscópica descrita pelo parâmetro de ordem  $S$  e pela excentricidade  $e$ .

Por último, cabe lembrar que esta métrica não representa a métrica real do espaço onde o fenômeno acontece, esta permanecendo inalterada. Por exemplo, colocando uma amostra nemática entre duas placas de vidro, temos que a métrica das superfícies de vidro é a mesma de uma superfície plana. Essa amostra conterá defeitos do tipo disclinação. Fazendo um feixe de luz incidir paralelamente às placas, sobre a amostra, a luz “sentirá” a métrica gerada por esses defeitos e não a da superfície plana das placas de vidro. Agora, será analisado como a luz se propaga ante aos vários tipos de disclinações possíveis, tendo em vista que a amostra nemática obedecerá a essa métrica.

### 5.3 A Trajetória da Luz ao redor de Disclinações em Nemáticos

De posse da métrica que descreve a geometria de um cristal líquido nemático, e considerando que os raios de luz são descritas por geodésicas neste meio<sup>67</sup>, pode-se calcular suas trajetórias para uma determinada configuração do diretor. Contudo, é preciso fornecer uma configuração para o diretor, pois a métrica (5.25) depende do parâmetro de ordem tensorial que, por sua vez depende do diretor. Ou seja, é preciso dizer como as moléculas nemáticas estão arranjadas na amostra. Neste trabalho foram escolhidas, por simplicidade, configurações planas de disclinações, sendo possível, entretanto, expandir o estudo para configurações tridimensionais. Como exposto anteriormente, as configurações do diretor são tais que a energia livre de Frank seja mínima. Uma vez determinada a configuração do diretor, os símbolos de Christoffel são facilmente calculados. No apêndice A as duas equações paramétricas da trajetória são explicitadas, com o tempo sendo o parâmetro.

As equações foram resolvidas numericamente, utilizando o comando *NDSolve* do *software* Mathematica, e em seguida plotadas conjuntamente com seus defeitos. Note que, como  $k$  e  $c$  aparecem explicitamente nas equações, cada trajetória plotada fica automaticamente conectada com o seu respectivo defeito. Pode-se variar a excentricidade  $e$  das moléculas e o parâmetro de ordem  $S$  para verificar como a trajetória da luz varia com esses parâmetros. As quatro condições iniciais

necessárias,  $x(0), y(0)$  e  $\dot{x}(0), \dot{y}(0)$  são, respectivamente, as componentes da posição inicial dos raios de luz e as suas derivadas, e são importantes para determinar onde e em que direção os raios irão incidir. Por exemplo, se  $x(0) = 1, y(0) = -1, \dot{x}(0) = 1$  e  $\dot{y}(0) = 1$ , o feixe de luz iniciará na posição  $(1, -1)$  (sendo que pela origem passa o eixo de disclinação, ou seja, é o centro do defeito) com uma direção que faz um ângulo de  $45^\circ$  com o eixo  $x$ .

Nas figuras abaixo, são mostradas várias trajetórias para cada defeito em que foi utilizado os valores  $e = 0,78$  e  $S = 0,5$ , que são valores típicos para nemáticos<sup>17</sup>;

68

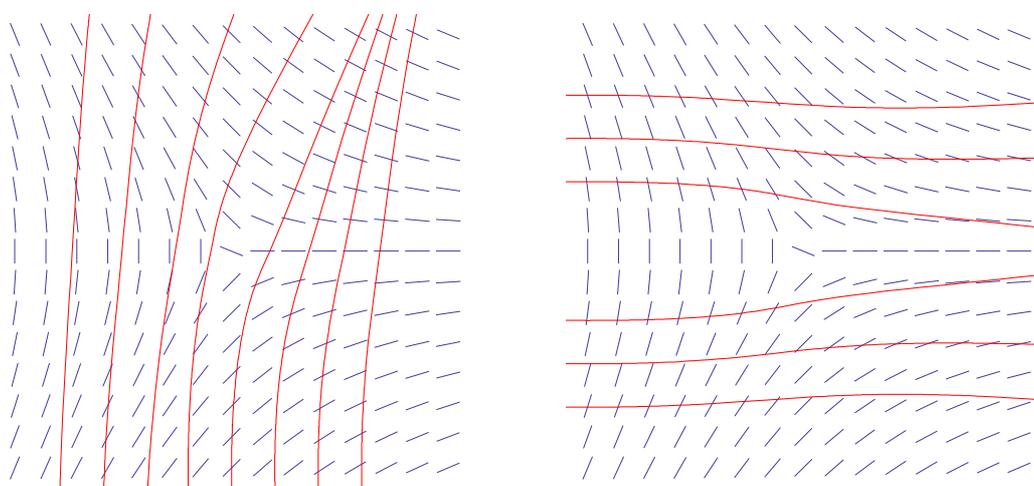


Figura 20. Campo diretor e trajetórias da luz para disclinações  $k = -1/2$  e  $c = 0$ .

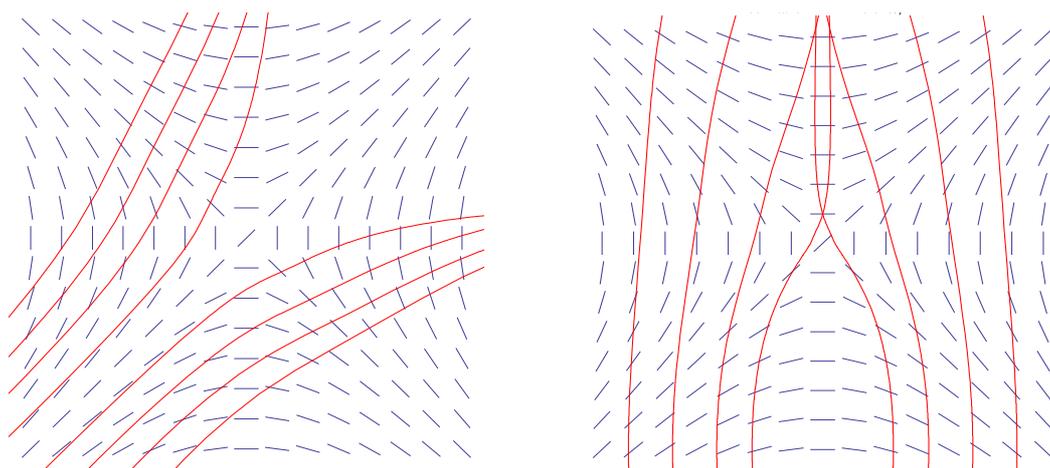


Figura 21. Campo diretor e trajetórias da luz para disclinações  $k = -1$  e  $c = \pi/2$ .

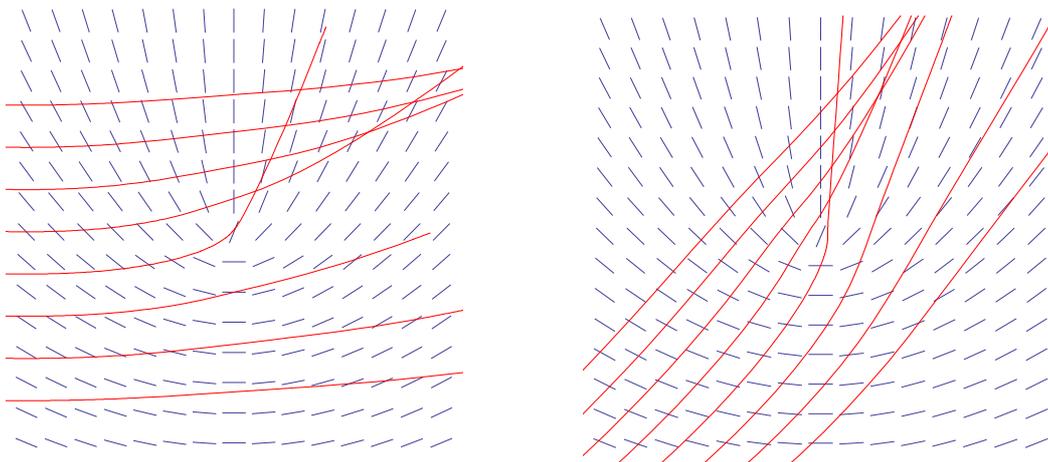


Figura 22. Campo diretor e trajetórias da luz para disclinações  $k = 1/2$  e  $c = \pi/4$ .

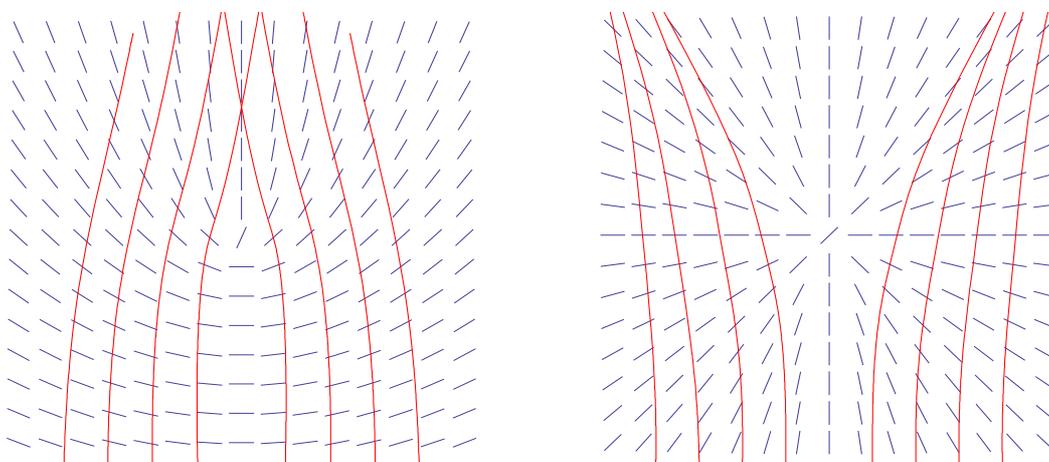


Figura 23. Campo diretor e trajetórias da luz para disclinações  $k = 1/2$  e  $c = \pi/4$  e para  $k = 1$  e  $c = 0$ .

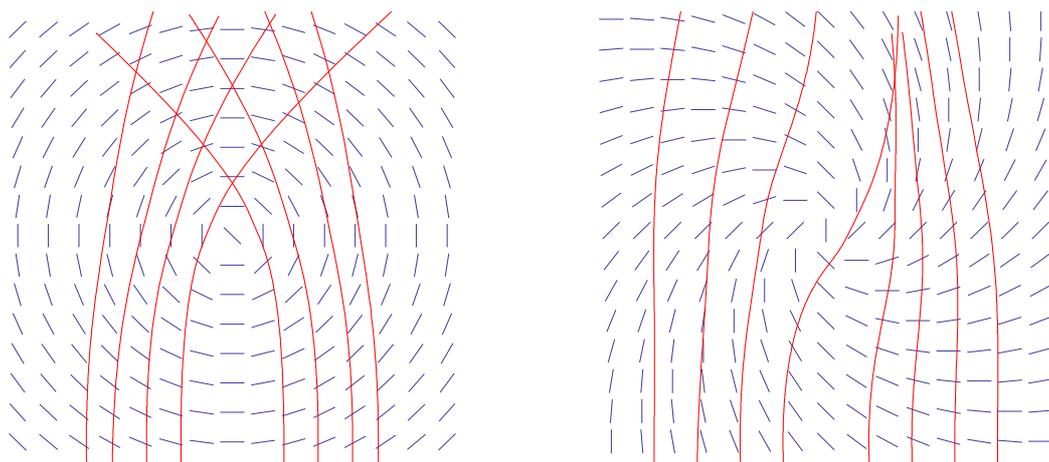


Figura 24. Campo diretor e trajetórias da luz para disclinações  $k = 1$  e  $c = \pi/2$  e para  $k = 1$  e  $c = \pi/4$ .

Primeiro, nota-se que a luz é desviada pelos centros dos defeitos da mesma maneira como, bidimensionalmente falando, a luz é desviada próximo a um campo

gravitacional. Ou seja, pode-se fazer uma analogia entre um defeito topológico em um nemático e um defeito topológico no espaço-tempo, estudar até que ponto a correlação é válida e usar os CL's nemáticos como laboratório para Cosmologia e Gravitação. Já há passos na direção de saber até que ponto essa relação é válida: foi proposta uma equação semelhante à Equação de Einstein da Relatividade Geral para os nemáticos<sup>9</sup>.

Segundo, os raios de luz que surgem paralelos entre si na amostra tendem a sofrer uma espécie de efeito de lente: tendem a convergir ou divergir. Os defeitos com  $k = -1$  e  $k = \pm 1/2$ , sendo assimétricos, possuem ambos os comportamentos dependendo do ângulo de incidência dos raios.

Com esse trabalho abre-se a possibilidade de verificar como a trajetória da luz é modificada quando se variam os parâmetros microscópicos da amostra, a saber, a excentricidade das moléculas,  $e$ , e o parâmetro de ordem escalar,  $S$ ; este último variando com temperatura, também pode informar como a trajetória é modificada pela agitação térmica. A figura 25 mostra três trajetórias da luz para diferentes valores da excentricidade. Quanto maior a excentricidade das moléculas maior o desvio sofrido pela luz, isto é, quanto mais anisotrópica a forma da molécula mais a luz “percebe” o efeito da métrica do nemático. A figura 26 mostra o mesmo defeito com três trajetórias, porém, manteve-se fixo a excentricidade e só foi variado o parâmetro de ordem escalar,  $S$ . Observa-se que as trajetórias são praticamente as mesmas, independente de se variar  $e$  ou  $S$ . Isto mostra que para variarmos

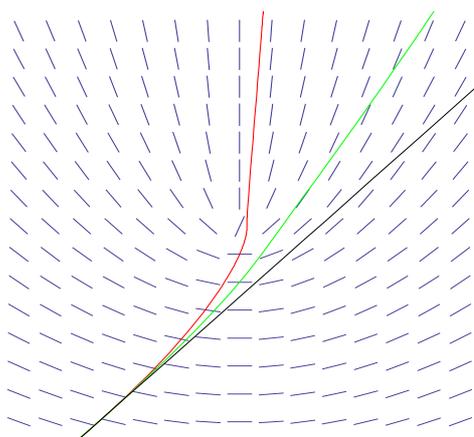


Figura 25. Variação da trajetória da luz para diferentes valores da excentricidade:  $e = 0$ , correspondendo a moléculas esféricas (Preto);  $e = 0,5$  (Verde);  $e = 0,78$  (Vermelho), estes dois últimos correspondendo a moléculas cada vez mais elipsoidais.

a trajetória seguida pela luz é suficiente modificarmos a anisotropia da amostra, o que é conseguido variando a temperatura – já que  $S = S(T)$  – ou variando a forma das moléculas (o que é conseguido, obviamente, mudando a substância da amostra). Quando mais anisotrópica for a amostra (maior valor de  $S$  e portanto menor a temperatura), maior será o desvio sofrido ao passar perto de um defeito.

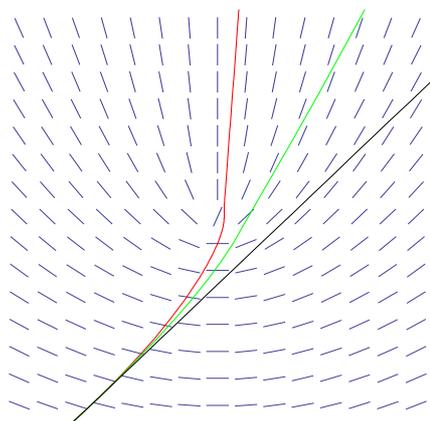


Figura 26. Variação da trajetória da luz para diferentes valores do parâmetro de ordem escalar:  $S = 0,01$ , correspondendo ao estado de total desordem (Preto);  $S = 0,4$  (Verde);  $S = 0,6$  (Vermelho), estes dois últimos correspondendo a moléculas cada vez mais ordenados.

Para uma ilustração das ideias apresentadas anteriormente tome-se a primeira configuração dada na Figura 20. Como os feixes emergem paralelos, se a amostra estivesse na fase isotrópica ( $S = 0$ ), eles permaneceriam retilíneos. Porém, a medida que se aproximam do centro, vão desviando da trajetória reta. Perceba que quanto mais próximo do centro do defeito mais a trajetória é desviada: os raios mais a esquerda ou mais a direita desviam-se menos que os raios que passam pelo centro. É como se, fazendo uma analogia gravitacional, no centro da disclinação houvesse uma distribuição de massa que modificasse a geometria do espaço ao redor e os raios seguem essa geometria (Fig. 27). Outro ponto importante a ser observado é que os raios estão constantemente sendo desviados, fato que não se observa em algumas configurações nos trabalhos da literatura pesquisados: os raios emergem retilíneos, são desviados pelos defeitos e seguem retilineamente.

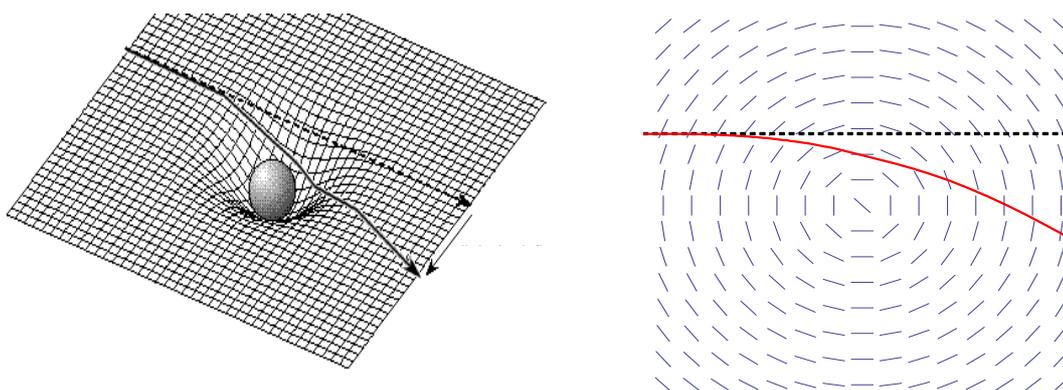


Figura 27. Analogia entre a trajetória da luz em uma amostra nemática com defeito e em um campo gravitacional. Os raios hachurados são as trajetórias que a luz seguiria se a geometria não fosse afetada.

## Capítulo 6

### CONCLUSÕES E PERSPECTIVAS

Foi visto, ao longo deste trabalho, a propagação da luz em cristais líquidos nemáticos com defeitos utilizando a métrica associada aos cristais líquidos nemáticos. Esta métrica, proposta por Simões *et al*, foi expressa em função de propriedades microscópicas como excentricidade das moléculas e parâmetro de ordem escalar.

Estudamos os defeitos em nemáticos, isto é, a variação brusca que ocorre na orientação das moléculas (diretor) devido a quebra de simetria na transição de fase. Considerando essas estruturas, estudamos o comportamento da luz quando seus raios passam próximas desses defeitos. Para isso, usamos uma teoria de primeiros princípios que possui validade para todos os cristais líquidos (cuja interação das moléculas ocorra via um potencial que possua simetria elipsoidal), e associamos a trajetória dos raios de luz a geodésicas. Assim, descrevemos como raios de luz se comportarão quando atravessarem uma amostra de CLN entre placas de vidro, paralelamente a essas placas.

Nossos resultados são satisfatórios pois reproduzem e melhoram os encontrados na literatura e reafirmam a validade da métrica dos CLN. Estudou-se a influência da excentricidade e do grau de ordenamento das moléculas de CL sobre as trajetórias e o efeito de lente convergente que ocorre em alguns defeitos. Além disso, foi citada a analogia entre esses resultados e os encontrados em Relatividade Geral.

Os estudos com disclinações perpendiculares, em duas ou três dimensões, que aqui não foram feitos, parecem ser a sequência natural de estudos nesse tema. Pode-se estendê-lo também aos CL colestéricos, já que também são do tipo nemático e, como possuem estrutura helicoidal, pode-se tentar observar se a luz se propagará em espiral! Além disso, outros estudos realizados anteriormente com CL podem ser revisitados utilizando abordagem via métrica de Simões.

## APÊNDICE A: Cálculo das Equações da Trajetória

Neste apêndice será mostrado, passo a passo, o processo de cálculo das equações da trajetória. A partir da métrica nas formas covariante e contravariante,

$$g_{ij} = A_1 B_1 \delta_{ij} + A_1 C Q_{ij}(n) \quad (\text{A.1})$$

$$g^{ij} = A_2 B_2 \delta^{ij} + A_2 C Q^{ij}(n) \quad (\text{A.2})$$

Em que

$$A_1 = \frac{1}{[3-e(1+2S)]} \quad (\text{A.3})$$

$$B_1 = (3 - e) \quad (\text{A.4})$$

$$A_2 = \frac{1}{[3-e(S-1)]} \quad (\text{A.5})$$

$$B_2 = 3 - e(S + 1) \quad (\text{A.6})$$

$$C = 3eS \quad (\text{A.7})$$

E combinando com o parâmetro de ordem tensorial,

$$Q_{ij} = \frac{1}{3} \delta_{ij} - n_i n_j \quad (\text{A.8})$$

$$Q^{ij} = a_0 \delta^{ij} + b_0 n^i n^j \quad (\text{A.9})$$

Obtém-se

$$g_{11} = A_1 B_1 + \frac{1}{3} A_1 C - A_1 C n_1 n_1 \quad (\text{A.10})$$

$$g_{12} = -A_1 C n_1 n_2 \quad (\text{A.11})$$

$$g_{21} = -A_1 C n_2 n_1 \quad (\text{A.12})$$

$$g_{22} = B_1 B_2 + \frac{1}{3} A_1 C - A_1 C n_2 n_2 \quad (\text{A.13})$$

E

$$g^{11} = A_2 B_2 + A_2 C a_0 + A_2 C n^1 n^1 \quad (\text{A.14})$$

$$g^{12} = A_2 C b_0 n^1 n^2 \quad (\text{A.15})$$

$$g^{21} = A_2 C b_0 n^2 n^1 \quad (\text{A.16})$$

$$g^{22} = A_2 B_2 + A_2 C a_0 + A_2 C b_0 n^2 n^2 \quad (\text{A.17})$$

Nas relações acima, correu-se os índices  $i, j$  para  $1, 2$ , correspondendo às coordenadas  $(x^1, x^2)$ , que nesse caso são  $(x, y)$ . Os parâmetros  $a_0$  e  $b_0$ , que podem ser calculados pela propriedade (3.45), são

$$a_0 = \frac{6-9S+e(-2-S+3S^2)}{3S[3+e(S-1)]} \quad (\text{A.18})$$

$$b_0 = \frac{3+e-eS}{3+e(S-1)} \quad (\text{A.19})$$

Levando em conta que a expressão para o diretor que fornece os defeitos é,

$$\hat{n} = (\cos \varphi, \sin \varphi, 0) \quad (\text{A.20})$$

Com

$$\varphi = k \operatorname{arctg} \left( \frac{y}{x} \right) + c, \quad c = \text{const.} \quad (\text{A.21})$$

Assim, as derivadas da métrica ficam,

$$\frac{\partial g_{11}}{\partial x^1} = \frac{\partial g_{xx}}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial x} (-A_1 C n_x^2) = -2A_1 C n_x \frac{\partial n_x}{\partial x} = -A_1 C \frac{k y \sin 2\varphi}{x^2 + y^2}$$

$$\frac{\partial g_{11}}{\partial x^2} = \frac{\partial g_{xx}}{\partial y} = -2A_1 C \frac{\partial n_x}{\partial y} = 2A_1 C \frac{k \sin \varphi}{x \left( 1 + \frac{y^2}{x^2} \right)}$$

$$\frac{\partial g_{xy}}{\partial x} = \frac{\partial g_{yx}}{\partial x} = -A_1 C \frac{\partial}{\partial x} (n_x n_y) = \frac{A_1 C k y \cos 2\varphi}{x^2 + y^2}$$

$$\frac{\partial g_{xy}}{\partial y} = \frac{\partial g_{yx}}{\partial y} = -A_1 C \frac{\partial}{\partial y} (n_x n_y) = -A_1 C \frac{k x \cos 2\varphi}{x^2 + y^2}$$

$$\frac{\partial g_{yy}}{\partial x} = -A_1 C \frac{\partial}{\partial y} (n_y^2) = A_1 C \frac{k y \sin 2\varphi}{x^2 + y^2}$$

$$\frac{\partial g_{yy}}{\partial y} = -2A_1C \frac{\partial n_y}{\partial y} = -2A_1C \frac{k \cos \varphi}{x \left(1 + \frac{y^2}{x^2}\right)}$$

Agora pode-se construir os símbolos de Christoffel, que por sua vez, entrarão nas equações da trajetória:

$$\ddot{x} + \Gamma_{11}^1 \dot{x}^2 + 2\Gamma_{12}^1 \dot{x}\dot{y} + \Gamma_{22}^1 \dot{y}^2 = 0 \quad (\text{A.22})$$

$$\ddot{y} + \Gamma_{11}^2 \dot{x}^2 + 2\Gamma_{12}^2 \dot{x}\dot{y} + \Gamma_{22}^2 \dot{y}^2 = 0 \quad (\text{A.23})$$

Com o auxílio do Mathematica®, calculam-se facilmente os símbolos de Christoffel. No Apêndice D estão listados os comandos do programa que faz esses cálculos. Inserindo-os nas equações acima, obtém-se:

$$\ddot{x}(t) - \frac{3ekS[\alpha y(t) - 3eSy(t)\cos(2\varphi) + 3eSx(t)\sin(2\varphi)][2\cos(2\varphi)\dot{x}(t)\dot{y}(t) + \sin(2\varphi)(-\dot{x}(t)^2 + \dot{y}(t)^2)]}{\beta[x(t)^2 + y(t)^2]} = 0$$

(A.24)

$$\ddot{y}(t) - \frac{3ekS[\alpha x(t) + 3eSx(t)\cos(2\varphi) + 3eSy(t)\sin(2\varphi)][-2\cos(2\varphi)\dot{x}(t)\dot{y}(t) + \sin(2\varphi)(\dot{x}(t)^2 - \dot{y}(t)^2)]}{\beta[x(t)^2 + y(t)^2]} = 0$$

(A.25)

Com

$$\alpha = (-6 + e(2 + S))$$

$$\beta = 4(-9 + 3e(2 + S) + e^2(-1 - S + 2S^2))$$

Que são as equações paramétricas da trajetória da luz, com o tempo sendo o parâmetro. São duas equações diferenciais ordinárias de segunda ordem homogêneas, não-lineares e acopladas. Elas podem ser resolvidas numericamente escolhendo valores adequados para  $e$ ,  $S$ ,  $k$  e  $c$ , além, obviamente, de terem suas condições iniciais especificadas. Também no Apêndice B encontram-se os comandos de um programa no Mathematica® que calcula as equações da geodésica.

## APÊNDICE B: Listagem dos programas utilizados

O PROGRAMA 1 calcula os símbolos de Christoffel e as equações da geodésica, tendo como entrada os elementos de matriz da métrica covariante e contravariante, a dimensão do espaço e as coordenadas utilizadas. Além disso, calcula o produto das matrizes para verificar que realmente resulta na matriz identidade. Os elementos de matriz foram calculados “à mão” por meio das expressões genéricas da métrica dadas em <sup>17</sup>. O algoritmo do programa não foi desenvolvido pelo autor da dissertação e está disponível em <<http://web.physics.ucsb.edu/~gravitybook/math/christoffel.pdf>>.

O PROGRAMA 2 calcula numericamente as equações da geodésica (calculadas no programa anterior) e plota a trajetória da luz conjuntamente com seu respectivo defeito. Este exemplo em particular calcula a trajetória da luz para o defeito com  $k = 1$  e  $c = \pi/2$ .

```
(*PROGRAMA 1*)
Clear[coord, metric, inversemetric, conexao, x, y, t, n, e, S, a, b, k, c, u];
n = 2;
coord = {x, y};
metric =

$$\left\{ \left\{ \frac{-3 + e - e S + 3 e S (\text{Cos}[k \text{ArcTan}[y/x] + c])^2}{-3 + e (1 + 2 S)}, \frac{3 e S \text{Cos}[k \text{ArcTan}[y/x] + c] \text{Sin}[k \text{ArcTan}[y/x] + c]}{-3 + e (1 + 2 S)} \right\}, \right.$$


$$\left. \left\{ \frac{3 e S \text{Cos}[k \text{ArcTan}[y/x] + c] \text{Sin}[k \text{ArcTan}[y/x] + c]}{-3 + e (1 + 2 S)}, \frac{-3 + e - e S + 3 e S (\text{Sin}[k \text{ArcTan}[y/x] + c])^2}{-3 + e (1 + 2 S)} \right\} \right\};$$

metric // MatrixForm
inversemetric =

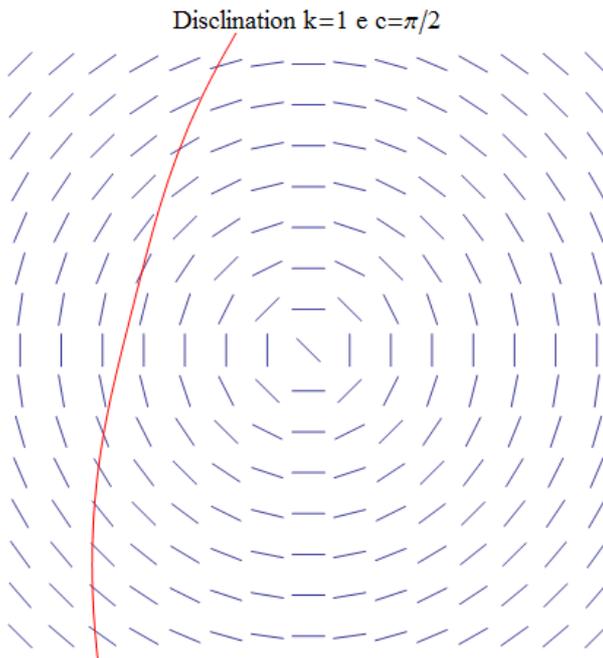
$$\left\{ \left\{ \frac{3 - e (1 + 2 S) + 3 e S (\text{Cos}[k \text{ArcTan}[y/x] + c])^2}{3 + e (-1 + S)}, \frac{3 e S \text{Cos}[k \text{ArcTan}[y/x] + c] \text{Sin}[k \text{ArcTan}[y/x] + c]}{3 + e (-1 + S)} \right\}, \right.$$


$$\left. \left\{ \frac{3 e S \text{Cos}[k \text{ArcTan}[y/x] + c] \text{Sin}[k \text{ArcTan}[y/x] + c]}{3 + e (-1 + S)}, \frac{3 - e (1 + 2 S) + 3 e S (\text{Sin}[k \text{ArcTan}[y/x] + c])^2}{3 + e (-1 + S)} \right\} \right\};$$

inversemetric // MatrixForm
conexao :=
conexao =
Simplify[
Table[
(1/2) * Sum[(inversemetric[[i, s]]) *
(D[metric[[s, j]], coord[w]] + D[metric[[s, w]], coord[j]] -
D[metric[[j, w]], coord[[s]]]), {s, 1, n}], {i, 1, n}, {j, 1, n},
{w, 1, n}]];
listconexao :=
Table[If[UnsameQ[conexao[[i, j, w]], 0],
{ToString[Γ[i, j, w]], conexao[[i, j, w]]}, {i, 1, n}, {j, 1, n}, {w, 1, n}];
TableForm[Partition[DeleteCases[Flatten[listconexao], Null], 2],
TableSpacing → {2, 2}]
geodesic :=
geodesic =
Simplify[Table[-Sum[conexao[[i, j, w]] u[j] u[w], {j, 1, n}, {w, 1, n}],
{i, 1, n}]];
listgeodesic := Table[{"  $\frac{d^2}{dt^2}$  " ToString[u[i]], "=", geodesic[[i]]}, {i, 1, n}]
TableForm[listgeodesic, TableSpacing → {2}]
Simplify[Dot[matrix, inversemetric]];
% // MatrixForm
```

```
(*PROGRAMA 2*)
Clear[x, y, e, S, k, t, sol, Eqn1, Eqn2, Eqns, u, v, s, r];
u = VectorPlot[{{Cos[ArcTan[s, r] +  $\frac{\pi}{2}$ ], Sin[ArcTan[s, r] +  $\frac{\pi}{2}$ ]},
  {s, -20, 20}, {r, -20, 20}, VectorScale -> Tiny, VectorStyle -> Arrowheads[0],
  Frame -> None, PlotLabel -> "Disclination k=1 e c= $\pi/2$ "};

e = 0.78;
S = 0.6;
k = 1;
c =  $\frac{\pi}{2}$ ;
Eqn1 =
  {-x''[t] +
    (3 e k S ((-6 + e (2 + S)) y[t] - 3 e S y[t] Cos[2 (c + k ArcTan[x[t], y[t]])] +
      3 e S x[t] Sin[2 (c + k ArcTan[x[t], y[t]])])
    (2 Cos[2 (c + k ArcTan[x[t], y[t]])] x'[t] y'[t] +
      Sin[2 (c + k ArcTan[x[t], y[t]])] (-x'[t]^2 + y'[t]^2))) /
    (4 (-9 + 3 e (2 + S) + e^2 (-1 - S + 2 S^2)) (x[t]^2 + y[t]^2)) = 0};
Eqn2 =
  {-y''[t] +
    (3 e k S ((-6 + e (2 + S)) x[t] + 3 e S x[t] Cos[2 (c + k ArcTan[x[t], y[t]])] +
      3 e S y[t] Sin[2 (c + k ArcTan[x[t], y[t]])])
    (-2 Cos[2 (c + k ArcTan[x[t], y[t]])] x'[t] y'[t] +
      Sin[2 (c + k ArcTan[x[t], y[t]])] (x'[t]^2 - y'[t]^2))) /
    (4 (-9 + 3 e (2 + S) + e^2 (-1 - S + 2 S^2)) (x[t]^2 + y[t]^2)) = 0};
Eqns = {Eqn1, Eqn2, x[0] = -15, x'[0] = 0, y[0] = -15, y'[0] = 1};
sol = NDSolve[Eqns, {x, y}, {t, -60, 60}];
v = ParametricPlot[Evaluate[{x[t], y[t]} /. sol], {t, -60, 60},
  PlotStyle -> Red];
Show[u, v]
```



### APÊNDICE C: Solução da equação da energia livre de Frank

Para descrever as configurações do diretor, será feita uma aproximação para as constantes elásticas, tendo em vista que elas possuem a mesma ordem de grandeza, sendo assim temos,  $K_1 = K_2 = K_3 = K$ . A equação (4.2) toma a seguinte forma:

$$f = \frac{1}{2}K[(div\mathbf{n})^2 + (\mathbf{n} \cdot rot\mathbf{n})^2 + (\mathbf{n} \times rot\mathbf{n})^2] \quad (C.1)$$

Sendo as componentes do vetor diretor da figura 14 dadas por:

$$\begin{cases} n_x = \cos \varphi(x, y) \\ n_y = \sin \varphi(x, y) \\ n_z = 0 \end{cases} \quad (C.2)$$

Calcula-se o divergente, o produto interno com o rotacional, e o produto vetorial com o rotacional do diretor, obtemos respectivamente,

$$div \mathbf{n} = -\sin \varphi \frac{\partial \varphi}{\partial x} + \cos \varphi \frac{\partial \varphi}{\partial y} \quad (C.3)$$

$$\mathbf{n} \cdot rot\mathbf{n} = 0 \quad (C.4)$$

$$\mathbf{n} \times rot \mathbf{n} = \left( \sin \varphi \cos \varphi \frac{\partial \varphi}{\partial x} + \sin^2 \varphi \frac{\partial \varphi}{\partial y} \right) \mathbf{i} - \left( \sin \varphi \cos \varphi \frac{\partial \varphi}{\partial y} + \cos^2 \varphi \frac{\partial \varphi}{\partial x} \right) \mathbf{j} \quad (C.5)$$

Substituindo esses resultados na equação (4.2)obtemos:

$$f = \frac{K}{2} \left[ \left( \frac{\partial \varphi}{\partial x} \right)^2 + \left( \frac{\partial \varphi}{\partial y} \right)^2 \right] = \frac{K}{2} (\nabla \varphi)^2 \quad (C.6)$$

A configuração do diretor em torno da declinação pode possuir tal forma que minimize a energia livre. Para este fim, será reescrito a equação (4.6) considerando a ausência de forças de corpo externas,  $\gamma = 0$ , ou seja:

$$\left( \frac{\partial f}{\partial n_{i,j}} \right)_{,j} - \frac{\partial f}{\partial n_i} = 0 \quad (C.7)$$

Substituindo a equação (C.6) na (C.7), chega-se a

$$\nabla^2 \varphi = 0 \quad (\text{C.8})$$

Que corresponde à equação de Laplace bidimensional.

Para obter a solução da equação (C.8), usa-se coordenadas polares  $(r, \theta)$ , explorando a simetria da amostra de cristal líquido por estarem contida no plano, ou seja,

$$\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( r \frac{\partial \varphi}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 \varphi}{\partial \theta^2} = 0 \quad (\text{C.9})$$

Aplicando o método de separação de variáveis e observando que a orientação do vetor diretor depende somente de  $\varphi(\theta)$ , chega-se a,

$$\frac{d^2 \varphi}{d\theta^2} = 0 \quad (\text{C.10})$$

Resolvendo esta equação, encontra-se uma solução linear,

$$\varphi(\theta) = k\theta + c \quad (\text{C.11})$$

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

## Bibliografia

- 1 CHANDRASEKHAR., S. **Liquid Crystals**. 2nd. Cambridge University Press, 1977. 460 ISBN 052142741x.
- 2 MOSLEY., A. Liquid Crystals Displays - an overview. **Displays**, v. 14, n. 2, p. 67, 1993.
- 3 CUPELLI., D. et al. Self-adjusting smart windows based on polymer-dispersed liquid crystals. **Solar Energy Materials and Solar Cells**, v. 93, n. 11, p. 2008, 2009.
- 4 CHILDS., P. R. N.; GREENWOOD., J. R.; LONG., C. A. Review of Temperature Measurement. **Review of Scientific Instruments**, v. 71, n. 8, p. 2959, 2000.
- 5 IWAI., H.; FUKUSAWA., J.; SUZUKI., T. A Liquid Crystal Application in Skin Care Cosmetics. **International Journal of Cosmetic Science**, v. 20, n. 2, p. 87, 1998.
- 6 CHUANG., I. et al. Cosmology in the Laboratory: Defects Dynamics in Liquid Crystals. **Science**, v. 251, p. 1336, 1991.
- 7 BOWICK., M. J. et al. The Cosmological Kibble Mechanism in the Laboratory: String Formation in Liquid Crystals. **Science**, v. 263, p. 5149, 1994.
- 8 SÁTIRO., C.; MORAES., F. A Liquid Crystal Analogue of the Cosmic String. **Modern Physics Letters A**, v. 20, n. 33, p. 2561, 2005.
- 9 MANOEL SIMÕES, M. P. Liquid Crystal Cosmology. **Europhysics Journal**, v. 26, n. 4, p. 188, 2008.
- 10 MAUGUIN, C. V. On the Liquid Crystals of Lehmann. **Bulletin de la Société Française de Minéralogie**, v. 34, p. 71, 1911.
- 11 KOSMOPOULOS., J. A.; ZENGINOGLU., H. M. **Applied Optics**, v. 26, n. 9, 1987.
- 12 ZENGINOGLU., H. M.; KOSMOPOULOS., J. A. **Applied Optics**, v. 28, n. 15, 1989.
- 13 JOETS., A.; RIBOTTA., R. A Geometrical Model for the Propagation of rays in an Anisotropic Inhomogeneous Medium. **Optics Communications**, v. 107, p. 200, 1994.
- 14 SÁTIRO., C.; MORAES., F. On the deflection of light by topological defects in nematic liquid crystals. **The European Physical Journal E**, v. 25, p. 425-429, 2008.

- 15 \_\_\_\_\_Lensing Effects in a nematic Liquid Crystal with Topological Defects.**The European Physical Journal E**, v. 20, p. 173, 2006.
- 16 BAALSS., D.; HESS., S. **Physics Review Letters**, v. 57, p. 86, 1986.
- 17 SIMÕES., M.; CAMPOS., A. D.; BARBATO., D. Local affine-connection approach to the elastic constants of nematic liquid crystals. **Physical Review E**, v. 75, p. 61710, 2007.
- 18 REINITZER., F. Beiträge zur Kenntniss des Cholesterins. **Monatshefte für Chemie**, v. 9, p. 421, 1888.
- 19 LEHMANN., O. Über fließende Krystalle. **Zeitschrift für Physikalische Chemie**, v. 4, p. 462, 1889.
- 20 VORLÄNDER, D. **Berichte der Deutschen Chemischen Gesellschaft**, v. 40, p. 1970, 1907.
- 21 SLUCKIN., T.; DUNMUR., D.; STEGEMEYER., H. **Crystals That Flow: Classic Papers from the History of Liquid Crystals**. London: Taylor & Francis Routledge, 2004.
- 22 FRIEDEL., G. Les États Mésomorphe de la Matière. **Annales de Physique**, v. 18, p. 273, 1922.
- 23 OSEEN, C. W. **Trans. Faraday Soc.**, v. 29, p. 883, 1933.
- 24 ZÖCHER, H. **Trans. Faraday Soc.**, v. 29, p. 945, 1933.
- 25 FRANK, F. C. **Disc. Faraday Soc.**, v. 25, p. 19, 1958.
- 26 ERICKSEN, J. L. **Arch. Rational Mech. Anal.**, v. 4, p. 231, 1960.
- 27 \_\_\_\_\_. **Trans. Soc. Rheol.**, v. 5, p. 23, 1961.
- 28 LESLIE, F. M. **Quart. J. Mech. Appl. Math.**, v. 19, p. 357, 1966.
- 29 TSVETKOV., V. **Acta Physicochim.**, v. 16, p. 132, 1942.
- 30 MAIER., W.; SAUPE., A. **Zeitschrift Naturforsch.**, v. 13a, p. 564, 1958.
- 31 \_\_\_\_\_. **Z. Naturforsch.**, v. 14a, p. 882, 1959.
- 32 \_\_\_\_\_. **Z. Naturforsch.**, v. 15a, p. 287, 1960.
- 33 CASQUILHO., J. P.; TEIXEIRA., P. I. C. **Introdução à Física Estatística**. São Paulo: Livraria da Física, 2012.
- 34 GENNES., P. G. D. Short Range Order Effects in the Isotropic Phase of Nematics and Cholesterics. **Molecular Crystals and Liquid Crystals**, v. 12, p. 193, 1971.

- 35 The Nobel Prize in Physics 1991. 1991. Disponível em: <  
[http://www.nobelprize.org/nobel\\_prizes/physics/laureates/1991/](http://www.nobelprize.org/nobel_prizes/physics/laureates/1991/)>. Acesso em:  
31/05/2012.
- 36 STEPHEN., M. J.; STRALEY., J. P. Physics of Liquid Crystals. **Reviews of  
Modern Physics**, v. 46, n. 4, p. 618, 1974.
- 37 SINGH, S. **Liquid Crystals: Fundamentals**. Singapore: World Scientific,  
2002. 531 ISBN 9810242506.
- 38 GATERMANN., L.; RITSCHKE., A. ÜberAzoxyphenoläther. **Ber.Deutsch.  
Chem. Ges.**, v. 23, p. 1738, 1890.
- 39 KELKER., H.; SCHEURLE., B. A Liquid-crystalline (Nematic) Phase with a  
Particularly Low Solidification Point. **Angew. Chem. Internat. Edit.** , v. 8, p.  
884, 1969.
- 40 GRAY., G. W.; HARRISON., K. J.; NASH., J. A. New Family of Nematic Liquid  
Crystals for Displays.**Eletronics Letters**, v. 9, p. 130, 1973.
- 41 STEWART, I. W. **The Static and Dynamic Continuum Theory of Liquid  
Crystals: A Mathematical Introduction**. London: Taylor & Francis, 2004.
- 42 ELLIOT,, A.; AMBROSE, E. J. **Disc. Faraday Soc.**, v. 9, n. 246, 1950.
- 43 BECHTOLD, I. H. Cristais Líquidos: Um sistema complexo de simples  
aplicação. **Revista Brasileira de Ensino de Física**, v. 27, n. 3, p. 333,2005.
- 44 GENNES., P. G. D.; PROST., J. **The Physics of Liquid Crystals**. 2nd. Oxford:  
Clarendon Press, 1993. 608 ISBN 0198520247.
- 45 HALLER, I. **Progresss in Solid State Chemistry**, v. 10, p. 103, 1975.
- 46 CHIRTOC., I. et al. **Liquid Crystals**, v. 31, n. 2, p. 229, 2004.
- 47 BARBERO., G.; EVANGELISTA., L. R. **An Elementary Course on the  
Continuum Theory for Nematic Liquid Crystals**.World Scientific, 2000.
- 48 ISLAM., N. **Tensors and their Applications**. New Delhi: New Age, 2006.
- 49 COUTO., R. T. Introdução aos tensores. 2003. Disponível em: <  
<http://www.professores.uff.br/rtoscano/tensores.pdf>>. Acesso em:  
11/06/2012.
- 50 FLEMING., H. Introdução aos tensores. 2001. Disponível em: <  
<http://www.hfleming.com/ricci.pdf>>. Acesso em: 11/06.
- 51 KOLECKI., J. C. An Introduction to Tensors for Students of Physics and  
Engineering.Ohio,2002. Disponível em: <

- 12/Numbers/Math/documents/Tensors\_TM2002211716.pdf >. Acesso em: 12/06/2012.
- 52 LANDAU., L. D.; LIFSHITZ., E. M. **The Classical Theory of Fields**. 4th. Elsevier, 1980. 402
- 53 KLEMAN., M.; LAVRETOVICH, O. D. **Soft Matter Physics: An Introduction**. New York: Springer, 2003. 637 ISBN 0387952675.
- 54 SENYUK., B. Main types of Liquid Crystals. Disponível em: < <http://dept.kent.edu/spie/liquidcrystals/nematics1.html> >. Acesso em: 05/07/2012.
- 55 ARFKEN., G. B.; WEBER., H. J. **Física Matemática: Métodos Matemáticos para Engenharia e Física**. 6ª. Rio de Janeiro: Elsevier, 2007.
- 56 R.REPNIK. et al. Physics of Defects in Nematic Liquid Crystals. **European Journal of Physics**.,v. 24, p. 481, 2003.
- 57 KIBBLE., T. J. **J. Phys.**, v. A9, p. 1387, 1976.
- 58 MORAES., F. Condensed Matter Physics as a Laboratory for Gravitation and Cosmology. **Brazilian Journal of Physics**, v. 30, n. 2, p. 304, 2000.
- 59 MADHUSUDANA., N. V.; PRATIBHA., R. High Strength Defects in Nematic Liquid Crystals. **Current Science**, v. 51, n. 18, p. 877, 1982.
- 60 KLEMAN., M.; LAVRETOVICH, O. D. Topological Point Defect in Nematic Liquid Crystals. **Philosophical Magazine**, v. 86, n. 25-26, p. 4117, 2006.
- 61 SAUPE., A. **Molecular Crystals and Liquid Crystals**, v. 21, p. 211, 1973.
- 62 SLUIJTER., M. et al. Applicability of Geometrical optics to in-plane liquid crystals configurations. **Optics Letters**, v. 35, n. 4, p. 487, 2010.
- 63 PANASYUK., G. et al. Geometrical Optics Approach in Films with three-dimensional Director Variations. **Physical Review E**, v. 67, p. 41702, 2003.
- 64 BORN., M.; WOLF., E. **Principles of Optics**. London: Pergamon Press, 1980.
- 65 GRANDJEAN., M. F. Les propriétés optiques de certaines structures de liquides anisotropes. **Bulletin de la Société Française de Minéralogie**, v. 42, p. 42, 1919. Disponível em: < <http://gallica.bnf.fr/ark:/12148/bpt6k109017n/f59.image.langPT> >.
- 66 JACKSON., J. D. **Classical Eletrodynamics**. New York: Wiley 1985.
- 67 KLINE., M.; KAY., I. W. **Eletromagnetic Theory and Geometrical Optics**. New York: Interscience, 1965.

- <sup>68</sup> SIMÕES, M.; D.S.SIMEÃO. Corresponding states of order parameter in nematic liquid crystals. **PhysicalReview E**, v. 74, p. 051701, 2006.