



**UNIVERSIDADE
ESTADUAL DE LONDRINA**

WILLYAN HENRIQUE PONTIM BERTOLINO

**O ESCALAR DE CURVATURA DE RICCI E A
ENERGIA ELÁSTICA LIVRE DE UMA AMOSTRA
NEMÁTICA**

Londrina

2018

WILLYAN HENRIQUE PONTIM BERTOLINO

**O ESCALAR DE CURVATURA DE RICCI E A
ENERGIA ELÁSTICA LIVRE DE UMA AMOSTRA
NEMÁTICA**

Tese apresentada ao Curso de Pós-Graduação em Física da Universidade Estadual de Londrina, como requisito parcial à obtenção do título de Doutor.

Orientador: Prof. Dr. Manuel Simões Filho

Londrina

2018

WILLYAN HENRIQUE PONTIM BERTOLINO

**O ESCALAR DE CURVATURA DE RICCI E A ENERGIA
ELÁSTICA LIVRE DE UMA AMOSTRA NEMÁTICA**

Tese apresentada ao Curso de Pós-Graduação, em Física, da Universidade Estadual de Londrina, como requisito parcial à obtenção do título de Doutor.

COMISSÃO EXAMINADORA

Prof. Dr. Manuel Simões Filho.

Universidade Estadual de Londrina (UEL)

Prof. Dr. Márcio Pazetti

Universidade Federal do Vale do São Francisco (UNIVASF-JUAZEIRO)

Prof. Dra. Sandra Mara Domiciano

Universidade Tecnológica Federal do Paraná (UTFPR-Cornélio Procópio)

Prof. Dr. Wladimir Sérgio Braga

Universidade Tecnológica Federal do Paraná (UTFPR-Campo Mourão)

Prof. Dr. Marcello Costa Ferreira

Universidade Estadual de Londrina (UEL)

Londrina, ____ de _____ de 2018

AGRADECIMENTOS

Em primeiro lugar, agradeço a CAPES pela ajuda financeira.

Ao Prof. Dr. Manuel Simões pela orientação e amadurecimento profissional ao longo de 8 anos de estudo.

A minha esposa Karoline pela grande ajuda nos momentos mais difíceis.

Aos professores e colegas de curso e a todos que colaboraram diretamente ou indiretamente para esta tese.

BERTOLINO, Willyan H. P. **O Escalar de curvatura de Ricci e a energia elástica livre de uma amostra nemática.** 2018, 61f. Tese (Doutorado em Física) – Universidade Estadual de Londrina, Londrina.

RESUMO

A descrição da elasticidade dos cristais líquidos nemáticos uniaxiais pela teoria do contínuo é feita pela energia livre de Frank. Nesta tese será mostrado que alguns de seus termos podem ser determinados pelo escalar de curvatura de Ricci associada à variedade diferencial determinada pelo campo diretor da amostra. O resultado foi obtido partindo de um modelo geométrico onde uma métrica foi construída para descrever a anisotropia observada nas medidas físicas e, a partir dessa métrica, obtém-se o tensor de curvatura e o escalar de curvatura de Ricci, R . Através de uma comparação de R com a energia livre de Frank, a energia elástica livre será expressa em duas partes, uma contendo os termos de twist, saddle-splay e splay-bend, que podem ser expressados em termos de R e outra contendo os termos de splay e bend que não estão contidos em R . Será mostrado também que os termos de splay e bend não aparecem em R porque suas geometrias são intrinsecamente planas, ou seja, de curvatura nula.

Palavras-chave: Métrica nemática. Curvatura escalar nemática. Energia elástica livre. Cristais líquidos nemáticos uniaxiais. Escalar de curvatura de Ricci. Geometria diferencial.

BERTOLINO, Willyan H. P. **The Ricci scalar curvature and the elastic free energy of a nematic sample**. 2018, 61f. Thesis (PhD in Physics) – Universidade Estadual de Londrina, Londrina.

ABSTRACT

The description of the elasticity of the uniaxial nematic liquid crystals by the continuous theory is made by Frank's free energy. In this thesis we will show that some of its terms can be determined by the Ricci scalar curvature associated with the differential variety determined by the sample director field. We obtained this result starting from a geometric model where we constructed a metric, describing the anisotropy observed in the physical measurements and, from this metric, we build the tensor of curvature as well as the Ricci's scalar curvature, R . Through a comparison of R with the free energy of Frank we have obtained that the free elastic energy can be expressed in two parts, one containing the terms of twist, saddle-splay and splay-bend, which can be expressed in terms of R and another containing the terms of splay and bend that are not contained in R . We will also show that the terms of splay and bend do not appear in R because their geometries are intrinsically flat, that is, of zero curvature.

Key-words: Nematical metrics. Nematic scalar curvature. Free elastic energy. Uniaxial nematic liquid crystals. Ricci scalar curvature . Differential geometry.

LISTA DE FIGURAS

| | |
|---|----|
| Figura 2.1 – Esquema da classificação dos cristais líquidos termotrópicos | 11 |
| Figura 2.2 – Fase Nemática | 12 |
| Figura 2.3 – Moléculas Uniaxiais..... | 13 |
| Figura 2.4 – Orientação média | 15 |
| Figura 2.5 – Deformações Elásticas..... | 17 |
| Figura 3.1 – Componentes contravariantes e covariantes | 22 |
| Figura 3.2 – Sistema ortogonal em uma Superfície | 27 |
| Figura 3.3 – Plano Normal..... | 27 |
| Figura 3.4 – Curvatura de um Manifold a partir de um paralelogramo | 34 |
| Figura 4.1 – Texturas em Cristais Líquidos | 37 |
| Figura 4.2 – Vetor Diretor Tangente a uma Curva de um Manifold | 39 |
| Figura 4.3 – Deformação Splay | 48 |
| Figura 4.4 – Deformação Bend | 48 |

SUMÁRIO

| | | |
|-----|---|----|
| 1 | INTRODUÇÃO | 8 |
| 2 | CRISTAIS LÍQUIDOS | 10 |
| 2.1 | MESOFASES | 10 |
| 2.2 | CRISTAIS LÍQUIDOS NEMÁTICOS UNIAXIAIS | 12 |
| 2.3 | PARÂMETRO DE ORDEM | 14 |
| 2.4 | TEORIA MACROSCÓPICA DO CONTÍNUO PARA CRISTAIS LÍQUIDOS NEMÁTICOS | 15 |
| 3 | GEOMETRIA DIFERENCIAL | 18 |
| 3.1 | TENSORES: COMPONENTES CONTRAVARIANTES E COVARIANTES | 18 |
| 3.2 | CURVATURA GAUSSIANA DE UMA SUPERFÍCIE EM R^3 | 26 |
| 3.3 | GEOMETRIA RIEMANNIANA | 29 |
| 3.4 | TRANSPORTE PARALELO, DERIVADA COVARIANTE E CONEXÃO DE LEVI-CIVITA | 29 |
| 3.5 | TENSOR DE CURVATURA DE RIEMANN | 33 |
| 3.6 | TENSOR DE CURVATURA DE RICCI E ESCALAR DE RICCI | 34 |
| 4 | CURVATURA NEMÁTICA | 36 |
| 4.1 | TENSOR MÉTRICO NEMÁTICO..... | 38 |
| 4.2 | ESCALAR DE CURVATURA NEMÁTICO | 43 |
| 4.3 | ENERGIA ELÁSTICA LIVRE EM TERMOS DO ESCALAR DE CURVATURA NEMÁTICO..... | 47 |
| 5 | CONSIDERAÇÕES FINAIS E PERSPECTIVAS FUTURAS | 50 |
| | APÊNDICE A | 53 |
| | APÊNDICE B | 55 |
| | APÊNDICE C | 56 |
| | REFERÊNCIAS | 57 |

CAPÍTULO 1

INTRODUÇÃO

A descrição da elasticidade dos Cristais Líquidos pela teoria do contínuo foi proposta inicialmente em 1933 por Oseen [1] e é semelhante à teoria elástica dos sólidos [2]. Neste modelo, a orientação média das moléculas/micelas, representada pelo vetor diretor, \mathbf{n} , varia de ponto a ponto se existir deformação [3]. Estas deformações são causadas por interações moleculares tais como: interações eletrostáticas, interação de dispersão, interação estérica, potencial intermolecular, etc. [4]. A energia elástica livre de deformação associada a uma dada configuração de equilíbrio do vetor diretor é separada em cinco constantes elásticas, conhecidas como splay, twist, bend, saddle-splay e splay-bend e designadas por K_{11} , K_{22} , K_{33} , K_{24} e K_{13} , respectivamente [5-7].

As constantes elásticas K_{24} e K_{13} possuem contribuição de bordas (ancoramento) e contribuição para o volume da amostra (também chamado “bulk” em inglês) [5,8]. A determinação experimental destas constantes não é simples, e existem poucos modelos prevendo seus valores. Em especial, a constante K_{13} foi, por algum tempo, sujeita a uma controvérsia, o paradoxo de Oldano-Barbero [9-12]. Com relação às constantes K_{11} , K_{22} e K_{33} , existem vários modelos prevendo estes valores [8, 13-19] bem como suas determinações experimentais para uma série de compostos [8, 13-24]. A proposta de um modelo geométrico aqui apresentada revela

relações entre as constantes K_{22} , K_{24} e K_{13} simplificando a descrição dos cristais líquidos nemáticos uniaxiais.

No capítulo 2 será descrita a natureza dos cristais líquidos e suas fases, em que o foco consistirá nos nemáticos uniaxiais. Apresentaremos a teoria do contínuo para esta fase específica.

No capítulo 3 serão abordadas as operações básicas da álgebra tensorial, bem como os principais conceitos da geometria Riemanniana que levam ao escalar de curvatura de Ricci.

Já o capítulo 4, contém uma contribuição para a teoria dos cristais líquidos nemáticos uniaxiais. Será definida a métrica que permite calcular a curvatura escalar da variedade diferencial (manifold) tridimensional, ou seja, o escalar de curvatura de Ricci para três dimensões, onde os detalhes dos cálculos está disponível no site da referência [25]. Ainda neste capítulo será mostrado que os termos da energia elástica livre podem ser separados em termos que contribuem ou não para a curvatura; Uma interpretação geométrica do porquê tais termos não contribuem para esta curvatura será abordada. Além disso, o principal resultado deste trabalho que é a relação entre as constantes elásticas dos termos twist, saddle-splay e splay-bend, resultando em uma redução do número de constantes elásticas necessárias para a descrição dos nemáticos uniaxiais será apresentado.

O capítulo 5 constitui as considerações finais e as perspectivas futuras, enquanto que os apêndices A, B e C contêm, respectivamente, uma demonstração importante que reduz consideravelmente o número de termos do escalar de Ricci; o determinante do tensor métrico; e um exemplo de cálculo do produto vetorial usando derivada covariante.

CAPÍTULO 2

CRISTAIS LIQUIDOS

2.1 MESOFASES

Além das três fases da matéria amplamente conhecidas, que são: sólido, líquido e gasoso, diversos compostos orgânicos e sintéticos [26] apresentam uma série de fases intermediárias entre as fases sólida e líquida, chamadas *mesofases* ou *cristais líquidos* [26].

Nos cristais líquidos, as transições de fase podem ser induzidas, predominantemente, ou por mudanças de temperatura, caso em que os cristais líquidos são denominados *termotrópicos* [27], ou por influência da concentração de surfactantes, caso em que eles são chamados *liotrópicos* [28]. Os termotrópicos são importantes do ponto de vista de pesquisas e em aplicações comerciais, como em sensores, displays, etc. [29]. Alguns exemplos de termotrópicos são: o PAA (p-azoxyanisole) que exibe a fase nemática na faixa de temperatura de 116°C até 135°C (pressão atmosférica) [30], o 5CB (p-pentyl-p'-cyanobiphenyl), de 22,5°C até 35°C [31] e o MBBA (N-(p-methoxybenzylidene)-p'-n-butylaniline), de 22°C até 47°C [32]. Já os liotrópicos são de grande interesse biológico [33]; na área de cosméticos [34]; dispositivos eletrônicos modernos, como em micro-supercapacitores [35]; fármacos [36]; dentre outras aplicações.

Inicialmente, os cristais líquidos foram divididos em três grupos: nemáticos, colestéricos e esméticos [37]. Desde então, uma série de novas fases foram catalogadas, das quais, algumas delas relacionadas aos termotrópicos, podem ser vistas de forma esquemática pelo fluxograma da figura 2.1 [38]. Para uma descrição mais ampla das fases, ver o capítulo 4 de [39].

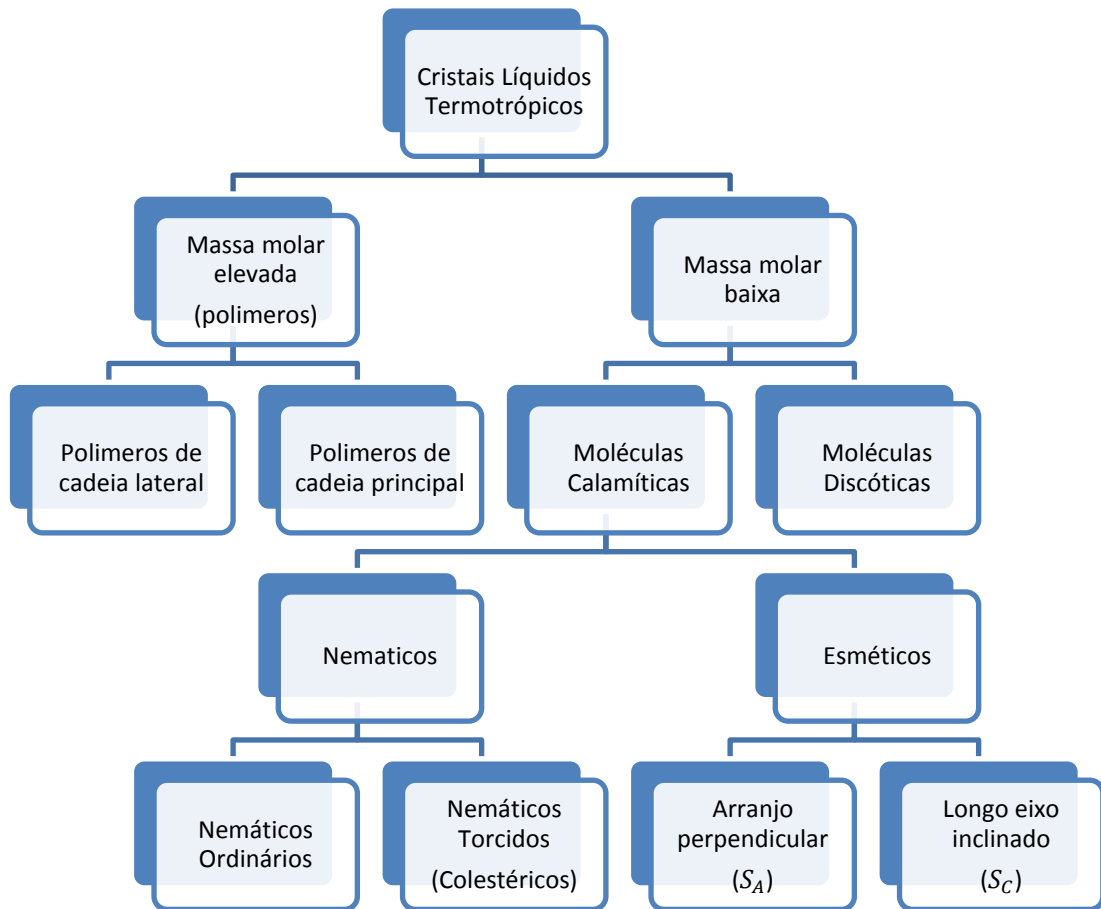


Figura 2.1 – Esquema da classificação dos cristais líquidos termotrópicos. Adaptado de [39].

As moléculas nos termotrópicos ou micelas (grupo de moléculas) nos liotrópicos que constituem o cristal líquido podem ser alongadas em forma de bastonetes, chamadas *calamíticas* [40]; em forma de discos, chamada *discóticas* [41]; em forma de ripas, chamadas *sanídicas* [42]; ou em forma de banana [43]. As dimensões variam desde moléculas extremamente pequenas, como no caso do PAA (p-azoxyanisole), com dimensões da ordem de $\sim 15 \times 10 \times 5 \text{ \AA}$ [44], até fragmentos de DNA genômico com comprimento da ordem de $10^2 \sim 10^3 \text{ \AA}$ [45].

2.2 CRISTAIS LÍQUIDOS NEMÁTICOS

Na fase nemática, as moléculas (ou micelas) tendem a alinhar-se paralelamente entre si ao longo de um eixo preferencial comum, chamado eixo anisotrópico. É conveniente introduzir um vetor unitário, \mathbf{n} , chamado diretor, como mostra a figura 2.2 a), para descrever a direção local do alinhamento molecular médio. Como estamos considerando moléculas apolares, as direções \mathbf{n} e $-\mathbf{n}$ são equivalentes [46]. Outra característica da fase nemática é que embora exista um alinhamento direcional, não há ordenamento de longo alcance do centro de gravidade das moléculas (semelhante aos líquidos convencionais) [de gennes], ou seja, não há ordenamento posicional de longo alcance, como mostra a figura 2.2 b).

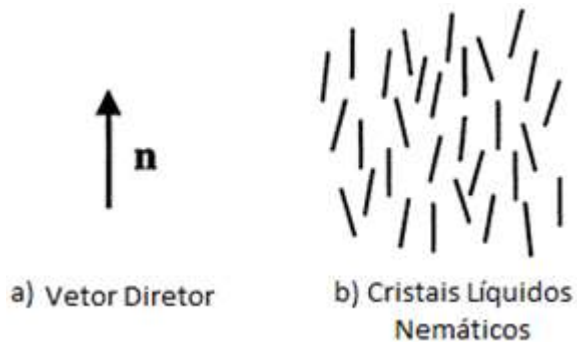


Figura 2.2 - Fase nemática. a) vetor diretor que caracteriza a direção do eixo óptico, b) Representação esquemática da configuração das moléculas na fase nemática (adaptado de [46]).

A direção do vetor diretor é obtida através de uma média estatística [7] que será definida na próxima seção. Isto porque uma molécula em equilíbrio térmico em uma dada temperatura possui graus de liberdade de vibração e de rotação satisfazendo certas regras da mecânica quântica, chamados *modos normais de vibração* e *modos normais de rotação* [47]. As referências [48-50] contêm dados espectroscópicos de algumas moléculas de cristais líquidos.

As moléculas uniaxiais possuem uma única direção principal, ou seja, dos três momentos principais de inércia I , dois são iguais e o outro é não nulo [47]. Existem dois casos:

- Simetria de topo prolato, caso em que $I_a < I_b = I_c$ (moléculas calamíticas).
- Simetria de topo oblato, caso em que $I_a > I_b = I_c$ (moléculas discóticas).

onde I_a, I_b e I_c são os momentos principais de inercia correspondendo aos três eixos principais de inercia, x_a, x_b e x_c , respectivamente [47]. A molécula uniaxial pode ser descrita por um vetor unitário, \mathbf{m} , que possui a direção do eixo principal de inercia x_a , como mostra a figura 2.3.

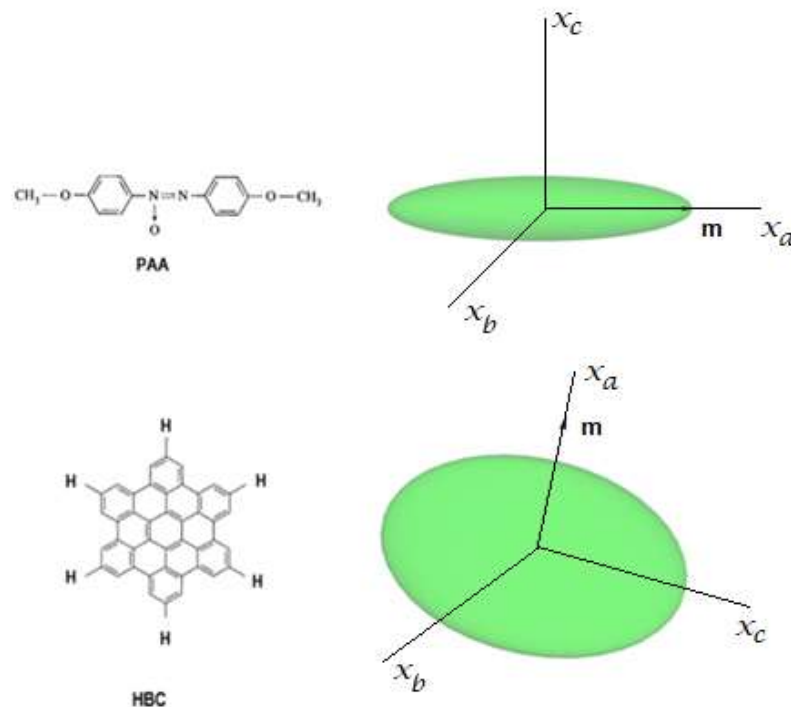


Figura 2.3 – Moléculas Uniaxiais – PAA (p-azoxyanisole) é um exemplo de molécula calamítica e HBC (hexa-peri-hexabenzocoronene) é um exemplo de molécula discótica. O eixo molecular é caracterizado pelo vetor \mathbf{m} .

Até o momento, várias mesofases foram catalogadas como variações da fase nemática, por exemplo: nemático quiral ou colestérico (N^*) [51], nemático discótico (N_D) [52], nemático re-entrante (N_{RE}) [53], nemático biaxial (N_B) [54,55], nemático splay-bend (N_{SB}) [56,57], dentre outras.

2.3 PARÂMETRO DE ORDEM

Vimos na seção anterior que as moléculas podem vibrar e girar em torno de seu centro de gravidade. Significa que a direção do vetor \mathbf{m} , que caracteriza a molécula, muda de direção a cada instante. A direção do vetor diretor, \mathbf{n} , é uma média estatística destas direções. Para analisar esta média, considere a projeção do vetor \mathbf{m} na direção do vetor \mathbf{n} , isto é, $\mathbf{m} \cdot \mathbf{n} = \cos \theta$, onde θ é o ângulo entre os vetores. Como toda função $f(\theta)$ axialmente simétrica pode ser expandida em série dos polinômios de Legendre $P_l(\cos \theta)$ [39], ou seja,

$$f(\theta) = f(\cos \theta) = \frac{1}{2} [1 + 3\langle P_1(\cos \theta) \rangle P_1(\cos \theta) + 5\langle P_2(\cos \theta) \rangle P_2(\cos \theta) + 7\langle P_3(\cos \theta) \rangle P_3(\cos \theta) + \dots] \quad (2.1)$$

onde,

$$P_l(\cos \theta) = \frac{1}{2^l l!} \frac{d^l}{dx^l} [(\cos^2 \theta - 1)^l] \quad (2.2)$$

pode-se considerar esta expansão para os nemáticos uniaxiais. Como as moléculas possuem centro de inversão (simetria cilíndrica), os termos ímpares de P_l da equação (2.1) desaparecem [39], com isto,

$$f(\theta) = f(\cos \theta) = \sum_{l=0}^{\infty} \frac{1}{2} (4l + 1) S_{2l} P_{2l}(\cos \theta) \quad (2.3)$$

em que, $S_{2l} = \langle P_{2l}(\cos \theta) \rangle$. A primeira média estatística do alinhamento não trivial de um nemático é o quadrupolo,

$$S_2 = \langle P_2(\cos \theta) \rangle = \frac{1}{2} \langle 3 \cos^2 \theta - 1 \rangle \quad (2.4)$$

onde a grandeza escalar S_2 é o *parâmetro de ordem escalar* (alguns autores representam apenas por S) e mede a dispersão de \mathbf{m} ao redor da direção definida por \mathbf{n} . Na fase isotrópica, $S_2 = 0$, pois as direções das moléculas são distribuídas randomicamente, e $\langle \cos^2 \theta \rangle = 1/3$. Se as moléculas estiverem perfeitamente alinhadas, $\langle (\mathbf{n} \cdot \mathbf{m})^2 \rangle = 1$ e $S_2 = 1$ [3], que constitui um sólido ideal. As mesofases possuem valores intermediários de S_2 entre zero e um. A figura 2.4 mostra um esquema de uma molécula girando, bem como das vibrações atômicas internas (modos normais de vibração) em torno da direção do vetor diretor. Medidas deste

parâmetro podem ser obtidas pela anisotropia da susceptibilidade magnética, como sugerido por de Gennes [3] (ou da anisotropia de qualquer outra propriedade física como: dicroísmo óptico, birrefringência, condutividade térmica e elétrica, difusão molecular, etc.), pela ressonância magnética nuclear, dentre outras.

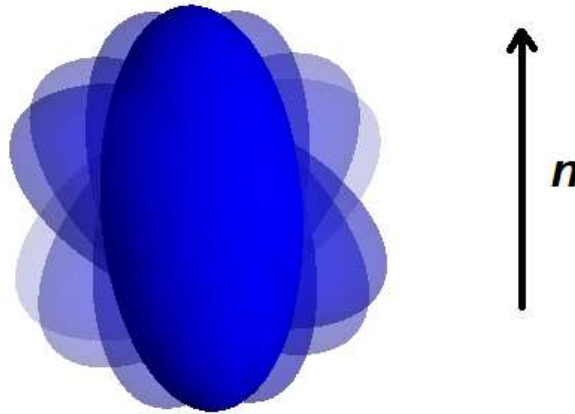


Figura 2.4 – Orientação média. As moléculas em equilíbrio térmico na fase nemática giram e oscilam (modos normais de vibração) em torno da direção média representada pelo vetor diretor n .

Já os parâmetros de ordem mais alta requerem técnicas mais sofisticadas. O parâmetro S_4 pode ser obtido por espalhamento de luz Raman, luminescência ou outro experimento com interação óptica de duas ondas [39]. Dados experimentais destes parâmetros para alguns compostos podem ser encontrados em [58-60]. Dados experimentais dos parâmetros S_6 e S_8 não foram determinados até o momento [39].

2.4 TEORIA MACROSCÓPICA DO CONTÍNUO PARA CRISTAIS LÍQUIDOS NEMÁTICOS

Nos sólidos elásticos, para pequenas deformações, o tensor de stress, σ_{ij} , é linear com o tensor de deformação, e_{ij} , ou seja,

$$\sigma_{ij} = C_{ijkl}e_{kl} \quad (2.5)$$

onde C_{ijkl} é o *tensor elástico*. A equação (2.5) é uma generalização da lei de Hook e a densidade de energia elástica de distorção é dada por [2],

$$g_{dis} = \frac{1}{2} C_{ijkl} e_{ij} e_{kl}. \quad (2.6)$$

De forma semelhante, as moléculas/micelas podem ser estudadas a partir de deformação elástica [1]. Se nenhuma força externa estiver atuando (elétrica, magnético, etc.), a deformação ocorre devido a interações intermoleculares [39], cujos principais mecanismos são: interações eletrostática, interação de dispersão, interação estérica e potencial intermolecular (para moléculas esféricas, o potencial de Lennard-Jones é usado enquanto que para moléculas alongadas, utiliza-se o potencial de Gay-Berne [61]), pontes de hidrogênio, interações hidrofílicas e hidrofóbicas, etc. [4]. Essas interações são da ordem de 0,01 – 0,1 eV enquanto que interações intramoleculares (em que ligações covalentes são predominantes nas moléculas orgânicas) são da ordem de 1 eV [39].

Nos nemáticos o stress é causado pela deformação do campo diretor. O tensor, $n_{i,j} = dn_i/dx_j$, cumpre o papel do tensor de distorção e_{ij} [39]. A densidade de energia livre, $f(\mathbf{r})$, é expandida em torno do estado de alinhamento paralelo uniforme, f_0 (detalhes podem ser encontrados em [5,7]). Frank [5] considerou termos até primeira ordem das derivadas espaciais (incluindo termos quadráticos), obtendo assim, a densidade de energia livre,

$$f = f_0 + f_d$$

onde f_d , é a densidade de energia livre devido a distorção do diretor, expressa por,

$$f_d = K_{ij} \frac{\partial n_i}{\partial x_j} + \frac{1}{2} K_{ijkl} \frac{\partial n_i}{\partial x_j} \frac{\partial n_k}{\partial x_l}. \quad (2.7)$$

Levando em conta as simetrias (\mathbf{n} coincide com a direção z , e rotações em torno do eixo z), f_d se resume à [5],

$$f_d = \frac{1}{2} K_{11} (\nabla \cdot \mathbf{n})^2 + \frac{1}{2} K_{22} (\mathbf{n} \cdot \nabla \times \mathbf{n})^2 + \frac{1}{2} K_{33} (\mathbf{n} \times \nabla \times \mathbf{n})^2 - (K_{22} + K_{24}) \nabla \cdot (\mathbf{n} \nabla \cdot \mathbf{n} + \mathbf{n} \times \nabla \times \mathbf{n}). \quad (2.8)$$

Para os cristais líquidos nemáticos, as constantes elásticas K_{11} , K_{22} , K_{33} e K_{24} são chamadas *splay*, *twist*, *bend* e *saddle-splay*, respectivamente [5]. De acordo

com o teorema do divergente de Gauss, o termo saddle-splay contribui para a energia livre de superfície e é chamado termo de superfície [5]. A Figura 2.4 mostra um esquema das configurações das moléculas nas deformações splay, twist e bend.

As constantes elásticas K_{11} , K_{22} e K_{33} são funções da temperatura e seus valores experimentais da ordem de $\sim 2 - 18 \times 10^{-7}$ dinas para o PAA e $\sim 1,5 - 10 \times 10^{-7}$ dinas para o MBBA [9]. Em ambos, verifica-se a relação $K_{33} > K_{11} > K_{22}$ para todas as temperaturas da fase nemática.

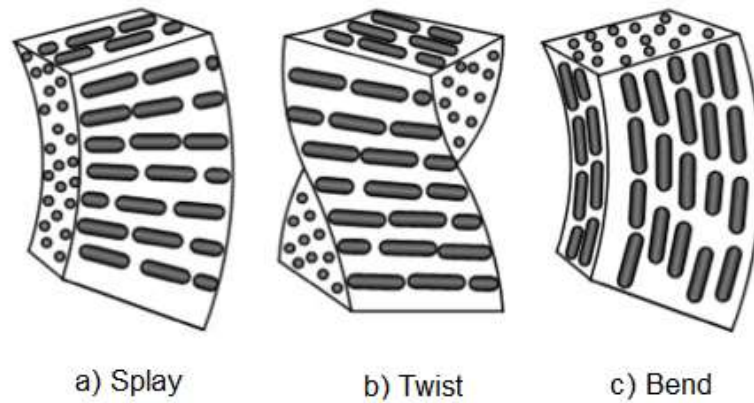


Figura 2.5 – Deformações Elásticas – a) representa a configuração das moléculas com deformação do tipo splay, b) deformações do tipo twist e c) deformações do tipo bend [62].

Em 1971, Nehring e Saupe mostraram que as contribuições dos termos de derivadas de segunda ordem, $n_{i,jk}$, eram da mesma ordem que termos de derivada de primeira ordem ao quadrado, e a energia livre de distorção para os nemáticos é escrita por,

$$F_{NS} = \frac{1}{2} K_{11} (\nabla \cdot \mathbf{n})^2 + \frac{1}{2} K_{22} (\mathbf{n} \cdot \nabla \times \mathbf{n})^2 + \frac{1}{2} K_{33} (\mathbf{n} \times \nabla \times \mathbf{n})^2 - (K_{22} + K_{24}) \nabla \cdot (\mathbf{n} \nabla \cdot \mathbf{n} + \mathbf{n} \times \nabla \times \mathbf{n}) + K_{13} \nabla \cdot [\mathbf{n} (\nabla \cdot \mathbf{n})] \quad (2.9)$$

onde K_{13} também é um termo de superfície, chamado de splay-bend [8].

CAPÍTULO 3

GEOMETRIA DIFERENCIAL

3.1 TENSORES: COMPONENTES CONTRAVARIANTES E COVARIANTES

Iniciaremos esta seção definindo um espaço vetorial seguindo [63].

Um espaço vetorial, E , sobre um campo Γ , é um conjunto de elementos x, y, \dots , chamados vetores, com a seguinte estrutura algébrica:

- I. E é um grupo aditivo, isto é, existe um mapa fixo $E \times E \rightarrow E$, denotado por,

$$(x, y) \rightarrow x + y$$

e satisfazendo os seguintes axiomas,

- i. $(x + y) + z = x + (y + z)$
- ii. $x + y = y + x$
- iii. Existe o vetor nulo $\mathbf{0}$; isto é, um vetor tal que $x + \mathbf{0} = \mathbf{0} + x = x$ para todo $x \in E$
- iv. Para cada vetor x existe o vetor $-x$ tal que $x + (-x) = \mathbf{0}$

- II. Existe um mapa fixo $\Gamma \times E \rightarrow E$, denotado por,

$$(\lambda, x) \rightarrow \lambda x$$

e satisfazendo os seguintes axiomas,

- i. $(\lambda\mu)x = \lambda(\mu x)$
- ii. $(\lambda + \mu)x = \lambda x + \mu x$
 $\lambda(x + y) = \lambda x + \lambda y$
- iii. $1 \cdot x = x$

Qualquer vetor $x \in E$ pode ser escritos em termos de uma família de vetores, chamados vetores da base (a condição para que este conjunto de vetores seja uma base de E é que eles sejam simultaneamente um sistema de geradores e linearmente independente [63]). Com base na referência [64], o vetor A é escrito por,

$$A = A^1 e_1 + A^2 e_2 + A^3 e_3 \quad (3.1)$$

onde A^1, A^2 e A^3 são as *componentes do vetor* e e_1, e_2 e e_3 são os vetores da base.

Outro conceito elementar é a operação chamada *produto escalar* definida por $u \cdot v = \|u\| \|v\| \cos \theta$, em que θ é o ângulo entre os vetores u e v . Pode-se demonstrar, usando o teorema de Pitágoras, uma relação entre o produto escalar e as componentes dos vetores,

$$u \cdot v = u^1 v^1 + u^2 v^2 + u^3 v^3 = \sum_{i,j} \delta_{ij} u^i v^j. \quad (3.2)$$

onde,

$$\delta_{ij} = \begin{cases} 1 & i = j \\ 0 & i \neq j. \end{cases} \quad (3.3)$$

O produto escalar é uma operação que permite obter a norma de um vetor a partir das componentes, por exemplo, para o vetor A ,

$$A \cdot A = \|A\|^2 = (A^1)^2 + (A^2)^2 + (A^3)^2. \quad (3.4)$$

Embora os valores das componentes dependam da base escolhida, a quantidade $\|A\|$, é um *invariante*, que quer dizer que a intensidade do vetor A é sempre a mesma não importando quais vetores constituem a base, nem o sistema de coordenadas adotado. Portanto, o *produto escalar é um invariante*.

A norma de um vetor também é obtida pela função distância, d , entre dois pontos [65]. Considere a seguinte definição para a função distância (que é o caso usual),

$$d(x, y) = \|x - y\|. \quad (3.5)$$

A intensidade do vetor \mathbf{A} , no sistema de coordenadas cartesianas, é a distância entre o ponto $P_A = (A^1, A^2, A^3)$ e a origem $O = (0,0,0)$, definido pela equação acima [65],

$$d(O, P_A) = \|O - P_A\| = \|\mathbf{A}\|. \quad (3.6)$$

A função distância, d , é um exemplo de *métrica* e satisfaz as seguintes propriedades:

- i) $d(P, Q) \geq 0$, onde a igualdade é válida se, e somente se $P = Q$
- ii) $d(P, Q) = d(Q, P)$
- iii) $d(P, Q) + d(Q, R) \geq d(P, R)$.

A métrica permite definir um *espaço métrico*:

“Um espaço métrico, representado por (X, d) , é um conjunto X equipado com a métrica $d: X \times X \rightarrow R$ satisfazendo as três condições i), ii) e iii)” [65].

Desta forma, o espaço Euclidiano é um espaço métrico onde o tensor δ_{ij} , definido pela equação (3.3), é chamado *tensor métrico*, pois relaciona a distância com as componentes. A distância entre dois pontos infinitesimalmente próximos, pertencentes a uma curva, também chamado de comprimento de arco, ds , é dado por,

$$ds^2 = \sum_{i,j} \delta_{ij} dx^i dx^j \quad (3.7)$$

Vale destacar que norma e métrica são coisas distintas. Norma é o tamanho de *um único* vetor e métrica é a distância entre *pares* de pontos. Como veremos na seção 3.3, no espaço Riemanniano a norma não precisa coincidir com a distância entre dois pontos.

O produto escalar permite determinar as componentes do vetor, através de projeções. A projeção do vetor \mathbf{u} na direção do vetor \mathbf{v} é definida por,

$$proj_{\mathbf{v}} \mathbf{u} = \frac{\mathbf{u} \cdot \mathbf{v}}{\|\mathbf{u}\| \|\mathbf{v}\|} \quad (3.8)$$

Se a projeção do vetor \mathbf{u} na direção do vetor \mathbf{v} for nula, tais vetores são chamados *ortogonais* e o produto escalar entre eles é nulo, em símbolos,

$$\mathbf{u} \cdot \mathbf{v} = 0. \quad (3.9)$$

Se os vetores forem unitários e ortogonais, chamados *ortonormais*, eles satisfazem a relação,

$$\mathbf{e}_i \cdot \mathbf{e}_j = \delta_{ij} \quad (3.10)$$

onde \mathbf{e}_i são vetores unitário da base, com $i, j = 1, 2, 3$ e δ_{ij} é definido pela equação (3.3).

Quando os vetores da base não são ortogonais, a projeção pode ser feita paralela ou perpendicularmente aos eixos que contém os vetores da base. Se a projeção é feita paralelamente aos eixos, as componentes são chamadas *contravariantes* e denotadas por índices sobrescritos $A^1, A^2, etc.$, enquanto que os vetores da base são descritos por índices subscritos $\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2, etc.$, como pode ser visto na figura 3.1 a). Entretanto, se as projeções são feitas perpendicularmente aos eixos, as componentes são chamadas *covariantes* e denotadas por índices subscritos $A_1, A_2, etc.$, enquanto os vetores da base são escritos por índices sobrescritos $\mathbf{e}^1, \mathbf{e}^2, etc.$, também chamado de *base dual*, como pode ser visto na figura 3.1 b). Portanto, o vetor \mathbf{A} pode ser escrito de duas formas equivalentes,

$$\mathbf{A} = A^i \mathbf{e}_i = A_i \mathbf{e}^i \quad (3.11)$$

onde foi utilizada a convenção de soma de Einstein, em que dois índices iguais (um covariante e outro contravariante) do mesmo lado da equação representa soma.

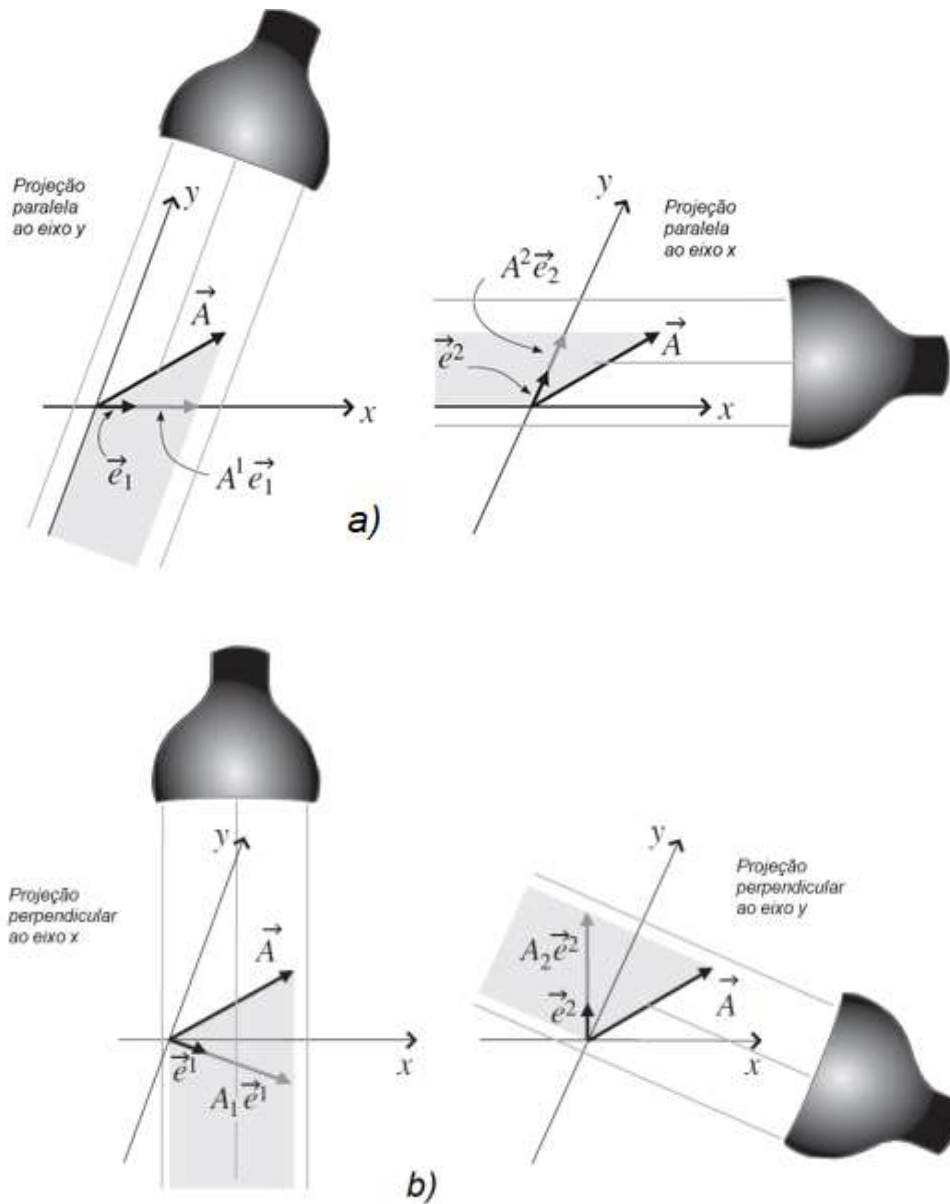


Figura 3.1- Componentes contravariantes e covariantes. a) as componentes contravariantes são obtidas por projeções paralelas aos eixos da base, b) já as componentes covariantes são obtidas por projeções perpendiculares (adaptado de [65]).

Uma vez escolhido os vetores da base e_i , os vetores da base dual e^i são obtidos,

$$\begin{aligned}
\mathbf{e}^1 &= \frac{\mathbf{e}_2 \times \mathbf{e}_3}{\mathbf{e}_1 \cdot (\mathbf{e}_2 \times \mathbf{e}_3)} \\
\mathbf{e}^2 &= \frac{\mathbf{e}_3 \times \mathbf{e}_1}{\mathbf{e}_1 \cdot (\mathbf{e}_2 \times \mathbf{e}_3)} \\
\mathbf{e}^3 &= \frac{\mathbf{e}_1 \times \mathbf{e}_2}{\mathbf{e}_1 \cdot (\mathbf{e}_2 \times \mathbf{e}_3)}.
\end{aligned} \tag{3.12}$$

Com esta definição, os vetores da base \mathbf{e}_j e os vetores da base dual \mathbf{e}^i satisfazem uma relação semelhante à equação (3.10), em símbolos,

$$\mathbf{e}^i \cdot \mathbf{e}_j = \delta_j^i \tag{3.13}$$

onde δ_j^i é o tensor delta de Kronecker misto, definido de maneira semelhante à equação (3.3),

$$\delta_j^i = \begin{cases} 1 & i = j \\ 0 & i \neq j. \end{cases} \tag{3.14}$$

As componentes covariantes e contravariantes do vetor \mathbf{A} podem ser obtidas pelos vetores da base através do produto escalar,

$$\begin{aligned}
A^i &= \mathbf{A} \cdot \mathbf{e}^i \\
A_i &= \mathbf{A} \cdot \mathbf{e}_i.
\end{aligned} \tag{3.15}$$

Fazendo o produto escalar do vetor \mathbf{A} com ele mesmo, usando a equação (3.11), tem-se,

$$\mathbf{A} \cdot \mathbf{A} = A^2 = A^i A_j (\mathbf{e}_i \cdot \mathbf{e}^j) \tag{3.16}$$

que, usando a definição de base dual dado pela equação (3.13), fica,

$$\mathbf{A} \cdot \mathbf{A} = A^2 = A^i A_i \tag{3.17}$$

que é a forma geral do produto escalar válida quando os vetores da base são ortogonais ou não. Quando a base é ortogonal e o sistema de coordenadas for o cartesiano, não há distinção entre as componentes covariante e contravariantes, $A^i = A_i$, pois as projeções feitas paralela ou perpendicularmente são exatamente iguais.

Outra relação para o produto escalar pode ainda ser obtida usando componentes da mesma base,

$$\mathbf{A} \cdot \mathbf{A} = A^i A^j (\mathbf{e}_i \cdot \mathbf{e}_j). \tag{3.18}$$

Se os vetores da base são ortogonais, $\mathbf{e}_i \cdot \mathbf{e}_j = \delta_{ij}$. Entretanto, se os vetores não são ortogonais ou o sistema de coordenadas não for o cartesiano (coordenadas polares, por exemplo), o tensor métrico δ_{ij} deve ser substituído pelo tensor métrico g_{ij} . Portanto,

$$g_{ij} = \mathbf{e}_i \cdot \mathbf{e}_j \quad (3.19)$$

e a equação (3.18) fica,

$$\mathbf{A} \cdot \mathbf{A} = g_{ij} A^i A^j. \quad (3.20)$$

Equivalentemente, em termos da base dual,

$$\mathbf{A} \cdot \mathbf{A} = A_i A_j (\mathbf{e}^i \cdot \mathbf{e}^j) \quad (3.21)$$

Em que o tensor métrico contravariante é definido,

$$g^{ij} = \mathbf{e}^i \cdot \mathbf{e}^j \quad (3.22)$$

e a equação (3.21) torna-se,

$$\mathbf{A} \cdot \mathbf{A} = g^{ij} A_i A_j. \quad (3.23)$$

Com estas definições e devido ao fato do produto escalar ser invariante, podemos mostrar uma importante propriedade dos tensores: a de subir e baixar índices. Comparando a equação (3.20) com a equação (3.17), temos,

$$g_{ij} A^i A^j = A^i A_i \quad (3.24)$$

e,

$$g_{ij} A^j = A_i \quad (3.25)$$

ou seja, o tensor métrico covariante atuando na componente contravariante fornece a componente covariante, como se tivesse “baixado” o índice. Equivalentemente,

$$g^{ij} A_j = A^i \quad (3.26)$$

e o tensor métrico contravariante atua como se tivesse “subido” o índice.

Os tensores métricos covariante g_{ij} , e contravariante g^{ij} , são inversos um do outro. Usando as equações (3.25) e (3.26), temos,

$$(g^{ik}A_k)(g_{ij}A^j) = A^iA_i \quad (3.27)$$

$$(g_{ij}g^{ik})A^jA_k = A^iA_i \quad (3.28)$$

esta relação só é verdadeira se,

$$g_{ij}g^{ik} = \delta_k^j \quad (3.29)$$

que é exatamente a definição de matrizes inversas.

Podemos, também, usar o tensor métrico para expressar o módulo do comprimento de arco infinitesimal $ds = dx^i e_i$,

$$ds^2 = g_{ij}dx^i dx^j \quad (3.30)$$

que é a equação fundamental para calcular comprimentos de curvas no espaço Riemanniano.

O tensor métrico g_{ij} é essencial quando se realiza uma mudança de um sistema de coordenadas para outro. Considere a mudança de coordenadas do sistema x^i para o sistema de coordenadas $x'^i(x^j)$, dada por,

$$x'^i = \frac{\partial x'^i}{\partial x^j} x^j. \quad (3.31)$$

Essa é a lei de transformação para vetores contravariantes, que são os vetores construídos de forma usual.

Já os vetores covariantes, como por exemplo, os vetores construídos a partir do operador gradiente atuando em uma função escalar, possuem uma lei de transformação diferente,

$$x'_i \equiv \frac{\partial f}{\partial x'^i} = \frac{\partial x^j}{\partial x'^i} \frac{\partial f}{\partial x^j}. \quad (3.32)$$

Usualmente, muitos autores diferenciam vetores covariantes de contravariantes pela lei de transformação de um sistema de coordenadas para outro [66,67], seguindo a proposição original de Ricci [68]. Essa mudança de coordenadas constitui a base para a relatividade [69,70].

As leis de transformações dadas pelas equações (3.31) e (3.32) podem ser estendidas para tensores de ordem mais alta [68] que, no caso do tensor métrico, é dado por,

$$g'_{ij} = g_{kl} \frac{\partial x^k}{\partial x'^i} \frac{\partial x^l}{\partial x'^j}. \quad (3.33)$$

3.2 CURVATURA GAUSSIANA DE UMA SUPERFÍCIE EM \mathbb{R}^3

O estudo de superfície é fundamental em diversas áreas da física, inclusive, nos cristais líquidos [71-74]. Especialmente importante é curvatura de Gauss de uma superfície [75-78]. Nesta seção apresentaremos uma breve discussão da curvatura de Gauss de uma superfície embutida no espaço tridimensional. Consideraremos apenas superfícies suaves (que possui derivadas parciais de todas as ordens) e regulares (que é suave e que os vetores tangentes à superfície sejam linearmente independentes em todos os pontos), e denotaremos por σ [79].

Antes de apresentarmos a curvatura de Gauss vamos definir a curvatura de uma curva e de uma superfície. Seja $\mathbf{r}(t)$ uma curva regular em \mathbb{R}^3 , onde t é um parâmetro. Se $\|\dot{\mathbf{r}}\| = \dot{r} = dr/dt = 1$, a curvatura é definida por [79],

$$k = \|\ddot{\mathbf{r}}\| \quad (3.34)$$

Considerando agora a superfície $\sigma(u, v)$, em que os parâmetros u e v definem a superfície. A curvatura de uma curva, $\mathbf{r} = \sigma(u(t), v(t))$ (com $\dot{r} = 1$), pertencente a esta superfície, é definida por,

$$k = \|\ddot{\mathbf{r}}\| = \sqrt{(k_n)^2 + (k_g)^2} \quad (3.35)$$

onde $\ddot{\mathbf{r}} = k_n \mathbf{N}_\sigma + k_g \mathbf{N}_\sigma \times \dot{\mathbf{r}}$ e $\mathbf{N}_\sigma = (\boldsymbol{\sigma}_u \times \boldsymbol{\sigma}_v) / \|\boldsymbol{\sigma}_u \times \boldsymbol{\sigma}_v\|$ (usando a notação $\boldsymbol{\sigma}_u = \partial\sigma/\partial u$) é o vetor normal padrão, como mostra a figura 3.2. A curvatura k_n é chamada *curvatura normal*, e é obtida pela projeção de $\ddot{\mathbf{r}}$ em \mathbf{N}_σ . Já a curvatura k_g , chamada *curvatura geodésica*, é obtida pela projeção de $\ddot{\mathbf{r}}$ em $\mathbf{N}_\sigma \times \dot{\mathbf{r}}$ [79,80].

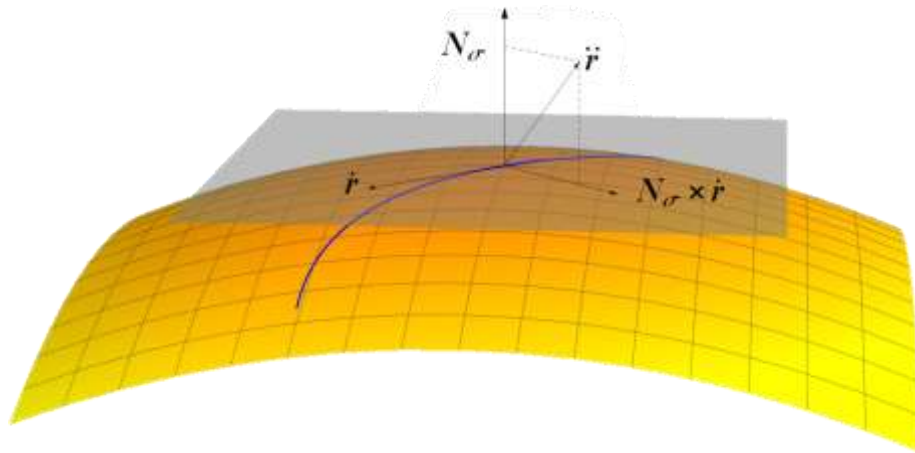


Figura 3.2 – Sistema ortogonal em uma superfície. Os vetores \dot{r} , N_σ e $N_\sigma \times \dot{r}$ formam um sistema ortogonal na superfície. O vetor \ddot{r} pode ser escrito em termos desta base.

Um caso especial ocorre quando a curva r é a interseção da superfície com um plano, ω , perpendicular ao plano tangente, chamado *plano normal*, como mostra a figura 3.3. Neste caso, a curvatura da curva r , coincide com a curvatura normal, $k = k_n$. Estas curvas especiais são chamadas *geodésicas*, já que a curvatura geodésica é nula [79].

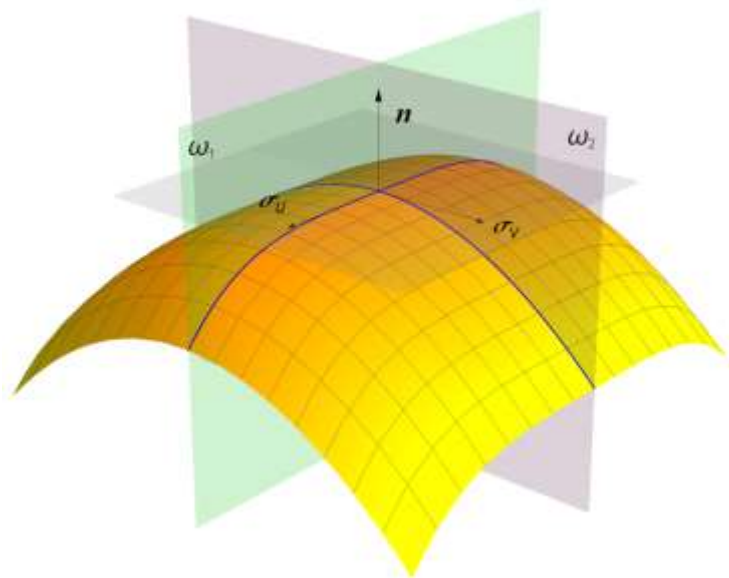


Figura 3.3 – Plano normal. O plano ω contendo os vetores n e \dot{r} é chamado de plano normal e intercepta a superfície em uma curva (em azul). Além disso, é perpendicular ao plano tangente formado pelos vetores σ_u e σ_v .

Se o plano ω for girado ao redor do vetor normal principal \mathbf{n} (que é a direção de $\dot{\mathbf{r}}$) uma curvatura mínima, obtida pela intersecção do plano ω_1 com a superfície, e uma curvatura máxima, obtida pela intersecção do plano ω_2 com a superfície, chamadas curvaturas principais, k_1 e k_2 , serão obtidas. Em 1827, Gauss descobriu que o produto das curvaturas principais é uma propriedade intrínseca da superfície [81], chamada de *curvatura de Gauss*, e representada por K ,

$$K = k_1 k_2. \quad (3.36)$$

A curvatura de Gauss preserva isomerias, ou seja, mudando a forma geométrica da superfície sem alterar o comprimento de uma curva qualquer pertencente a superfície, a curvatura de Gauss não muda. Por exemplo, se uma reta for desenhada em uma folha de papel plana e se esta superfície for transformada em um cilindro ou um cone, o comprimento da reta permanece o mesmo. Porém, é impossível transformar uma folha plana em uma esfera sem amassá-la, porque a curvatura de Gauss é diferente para cada superfície.

Quando $\|\dot{\mathbf{r}}\| \neq 1$, é fácil mostrar que a curvatura K , pode ser calculada por,

$$K = \frac{LN - M^2}{EG - F^2} \quad (3.37)$$

onde $L = \boldsymbol{\sigma}_{uu} \cdot \mathbf{N}_\sigma$, $M = \boldsymbol{\sigma}_{uv} \cdot \mathbf{N}_\sigma$, $N = \boldsymbol{\sigma}_{vv} \cdot \mathbf{N}_\sigma$, $E = \boldsymbol{\sigma}_u \cdot \boldsymbol{\sigma}_u$, $F = \boldsymbol{\sigma}_u \cdot \boldsymbol{\sigma}_v$ e $G = \boldsymbol{\sigma}_v \cdot \boldsymbol{\sigma}_v$ (a demonstração pode ser encontrada em [79]). Além disso, (fazendo $\|\dot{\mathbf{r}}\|^2 = (\boldsymbol{\sigma}_u \dot{u} + \boldsymbol{\sigma}_v \dot{v}) \cdot (\boldsymbol{\sigma}_u \dot{u} + \boldsymbol{\sigma}_v \dot{v})$), o comprimento de arco é dado por,

$$ds^2 = Edu^2 + 2Fdudv + Gdv^2 \quad (3.38)$$

que, comparando com a equação (3.30), verifica-se que $E = g_{11}$, $F = g_{12} = g_{21}$ e $G = g_{22}$.

É possível escrever a curvatura de Gauss em termos do tensor métrico g_{ij} , apenas. Esse é o famoso *teorema egregium de Gauss* (teorema notável de Gauss) que equivale a dizer que a curvatura K , pode ser determinada através de medidas de comprimento na própria superfície (detalhes pode ser encontrado [82]).

3.3 GEOMETRIA RIEMANNIANA

Nesta seção serão apresentados os principais conceitos da geometria Riemanniana, essenciais para o entendimento desta tese. Em 1854, Riemann generalizou a curvatura Gaussiana para espaços não Euclidiano, introduzindo o conceito de “n-fold” [83], hoje chamado de “*manifold*”.

Um *manifold diferenciável* é um espaço topológico que localmente se parece com o espaço Euclidiano e possui estrutura suficiente para que os conceitos do cálculo possam ser aplicados [84]. Por exemplo, superfícies embutidas no espaço Euclidiano tridimensional, discutidas na seção 3.2, constituem um manifold de dimensão dois.

De acordo com a seção 3.2, os vetores tangentes à superfície são essenciais para obter as componentes da métrica (3.38), no qual se fundamenta o teorema Egregium de Gauss. Também podemos obter a noção de vetor tangente da variedade diferenciável a partir da noção de derivada direcional no espaço Euclidiano [85].

Assim como a métrica Euclidiana é necessária para calcular comprimento de curvas no espaço Euclidiano, *métricas Riemannianas* são necessárias para calcular comprimento de curvas em espaços Riemannianos, e também, ângulos entre vetores tangentes (no mesmo espaço tangente) [86].

3.4 TRANSPORTE PARALELO, DERIVADA COVARIANTE E CONEXÃO DE LEVI-CIVITA

Vimos que o espaço Euclidiano é plano, ou seja, as componentes do tensor métrico, δ_{ij} , não dependem das coordenadas. Já o manifold pode ser curvo. Dizer que um manifold é curvo significa que quando se move do ponto P para um ponto vizinho P' , o espaço tangente $T_P(M)$ muda para o espaço tangente $T_{P'}(M)$. Uma conexão é essencialmente uma estrutura que permite comparar dois espaços tangentes de um par de pontos infinitesimalmente separados, isto é, a conexão é uma estrutura extra que especifica como se transporta um tensor ao longo de uma

curva. Se o transporte do vetor $\mathbf{v} \in T_p(M)$, ao longo da curva γ , do ponto P até P' , ocorrer de forma que o vetor não muda (suas componentes não mudam), ou seja, de forma que se mantenha paralelo a si mesmo, diz-se que ele foi transportado paralelamente. Existem várias formas de transportar um vetor paralelamente, um para cada escolha da conexão. Se o manifold possui uma métrica, existe uma escolha preferencial da conexão, chamada conexão de Levi-Civita. Especificamente, se a derivada covariante do tensor métrico for nula, a conexão afim é chamada de conexão métrica e, se, além disso, a conexão métrica não possuir torsão, que implica em $\Gamma_{\mu\nu}^\lambda = \Gamma_{\nu\mu}^\lambda$, ela é a conexão de Levi-Civita. Neste caso, se dois vetores \mathbf{u} e \mathbf{v} forem transportados paralelamente ao longo de qualquer curva, então o produto interno (que é uma generalização do produto escalar) permanece constante sobre o transporte paralelo. Quando o transporte paralelo de \mathbf{v} ao longo da curva γ coincide com o vetor tangente à curva, tais curvas especiais são chamadas geodésicas [87].

Para a conexão de Levi-Civita os coeficientes da conexão se resumem ao símbolo de Christoffel [88] (demonstração pode ser encontrada em [87]), ou seja,

$$\Gamma_{jk}^i = \frac{1}{2} g^{im} \left(\frac{\partial g_{km}}{\partial x^j} + \frac{\partial g_{jm}}{\partial x^k} - \frac{\partial g_{jk}}{\partial x^m} \right). \quad (3.39)$$

Vale destacar que a conexão não é um tensor (demonstração pode ser encontrada em [87,89]) que significa que não é possível dar um significado geométrico intrínseco do quanto um manifold é curvo analisando apenas a conexão. Isto é feito pelo tensor de curvatura a ser discutido na próxima seção.

Considerando a conexão de Levi-Civita, se t é um parâmetro da curva γ , então, a derivada covariante de \mathbf{v} é a taxa de variação de \mathbf{v} com relação t . A derivada covariante difere da derivada parcial e a quantidade que mede esta diferença é a conexão. Para ver isto, considere o vetor \mathbf{A} , representado em termos de componentes contravariantes,

$$\mathbf{A} = A^i \mathbf{e}_i. \quad (3.40)$$

A variação deste vetor na direção do eixo x^j é dada por [43],

$$\frac{\partial \mathbf{A}}{\partial x^j} = \frac{\partial A^i}{\partial x^j} \mathbf{e}_i + A^i \frac{\partial \mathbf{e}_i}{\partial x^j}. \quad (3.41)$$

Observe que os vetores da base dependem da posição. Podemos descrever esta variação em termos dos próprios vetores da base,

$$\frac{\partial \mathbf{e}_i}{\partial x^j} = \Gamma_{ij}^k \mathbf{e}_k \quad (3.42)$$

onde Γ_{ij}^k é a conexão de Levi-Civita que coincide com o símbolo de Christoffel, dado pela equação (3.39). Substituindo a equação (3.42) na equação (3.41) e fazendo uma mudança de índices ($i \leftrightarrow k$), temos,

$$\frac{\partial \mathbf{A}}{\partial x^j} = \left(\frac{\partial A^i}{\partial x^j} + A^k \Gamma_{kj}^i \right) \mathbf{e}_i. \quad (3.43)$$

O termo entre parêntesis na equação (3.43) é definido como a *derivada covariante* [87] do vetor \mathbf{A} , e representada por $\nabla_j A^i$, ou seja,

$$\nabla_j A^i \equiv \frac{\partial A^i}{\partial x^j} + A^k \Gamma_{kj}^i. \quad (3.44)$$

De forma semelhante, se o vetor for escrito em termos das componentes covariantes, a derivada covariante é dada por,

$$\nabla_j A_i \equiv \frac{\partial A_i}{\partial x^j} - A_k \Gamma_{ij}^k. \quad (3.45)$$

Portanto, a derivada covariante difere da derivada parcial pela conexão de Levi-Civita.

Geodésicas são curvas especiais do manifold em que a derivada covariante é nula. Isto significa que se trasladarmos paralelamente um vetor ao longo de uma geodésica, ele coincidirá com o vetor tangente a curva [91]. As curvas geodésicas podem ser encontradas resolvendo a equação diferencial,

$$\frac{d^2 x^i}{dt^2} + \Gamma_{jk}^i \frac{dx^j}{dt} \frac{dx^k}{dt} = 0 \quad (3.46)$$

onde x^i são as coordenadas da curva [91].

Podemos usar o operador, ∇ , para representar as derivadas covariantes. Se o tensor for de ordem (0,0), ou seja, um escalar f , a derivada covariante se reduz ao gradiente [80],

$$\nabla_j f = \frac{\partial f}{\partial x^j} \quad (3.47)$$

ou, na forma contravariante,

$$\nabla f = g^{ij} \nabla_j f = g^{ij} \frac{\partial f}{\partial x^j}. \quad (3.48)$$

Também podemos definir o divergente [80],

$$\nabla_i A^i \equiv \frac{\partial A^i}{\partial x^i} + A^k \Gamma_{ki}^i. \quad (3.49)$$

Na equação (3.39), o símbolo de Christoffel contraído, Γ_{ki}^i , pode ser escrito em termos do determinante da matriz dos coeficientes métricos g (a demonstração completa pode ser encontrada em [80] e, alternativamente, [89]),

$$\Gamma_{ki}^i = \frac{1}{\sqrt{g}} \frac{\partial}{\partial x^k} \sqrt{g} \quad (3.50)$$

e o divergente fica (após uma mudança de índice mudo $i \rightarrow k$ e $k \rightarrow i$),

$$\nabla \cdot \mathbf{A} = \nabla_i A^i = \frac{1}{\sqrt{g}} \frac{\partial}{\partial x^i} (\sqrt{g} A^i). \quad (3.51)$$

Outra relação muito importante é o produto vetorial entre dois vetores \mathbf{A} e \mathbf{B} , onde as componentes do vetor resultante são dadas por [80],

$$C^i = \epsilon^{ijk} A_j B_k \quad (3.52)$$

onde $\epsilon^{ijk} = (1/\sqrt{g})e^{ijk}$, e o tensor e^{ijk} , é o tensor de Levi-Civita completamente antissimétrico,

$$e^{ijk} = e_{ijk} = \begin{cases} 1 & \text{se o numero de permutação entre } i, j, k \text{ for par} \\ -1 & \text{se o numero de permutação entre } i, j, k \text{ for ímpar} \\ 0 & \text{para outros casos.} \end{cases} \quad (3.53)$$

Para o rotacional em termos da derivada covariante, temos [80],

$$(\nabla \times \mathbf{A})^i = \epsilon^{ijk} \nabla_j A_k. \quad (3.54)$$

Por fim, o Laplaciano pode ser expresso em termos da derivada covariante. Por definição, o Laplaciano é o divergente do gradiente representado por $\nabla^2 f = \nabla \cdot \nabla f$, usando as equações (3.48) e (3.51), temos [80],

$$\nabla^2 f = \frac{1}{\sqrt{g}} \frac{\partial}{\partial x^i} \left(\sqrt{g} g^{ij} \frac{\partial f}{\partial x^j} \right). \quad (3.55)$$

Obviamente, se o espaço for Euclidiano a derivada covariante se reduz a derivadas parciais usuais. Outras formas vetoriais podem ser encontradas em [80]. Usaremos estas definições no capítulo 4.

3.5 TENSOR DE CURVATURA DE RIEMANN

Em geral, a derivada covariante não comuta. A curvatura é uma medida da não comutatividade da derivada covariante. Considerando a conexão de Levi-Civita o tensor de curvatura de Riemann pode ser obtido pela relação de comutação [64],

$$\nabla_\gamma(\nabla_\beta A_\alpha) - \nabla_\beta(\nabla_\gamma A_\alpha) \quad (3.56)$$

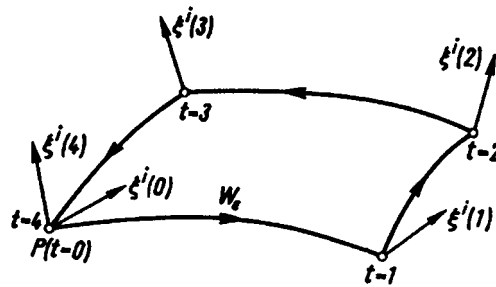
em que a derivada covariante é dada pela equação (3.36). Desenvolvendo esta equação (detalhes podem ser encontrados em [64]), obtém-se,

$$\nabla_\gamma(\nabla_\beta A_\alpha) - \nabla_\beta(\nabla_\gamma A_\alpha) = (\partial_\beta \Gamma_{\alpha\gamma}^\sigma - \partial_\gamma \Gamma_{\alpha\beta}^\sigma + \Gamma_{\alpha\gamma}^\tau \Gamma_{\tau\beta}^\sigma - \Gamma_{\alpha\beta}^\tau \Gamma_{\tau\gamma}^\sigma) A_\sigma \quad (3.57)$$

e o tensor de curvatura de Riemann é,

$$R_{\alpha\beta\gamma}^\sigma \equiv \partial_\beta \Gamma_{\mu\lambda}^\kappa - \partial_\lambda \Gamma_{\mu\nu}^\kappa + \Gamma_{\mu\lambda}^\rho \Gamma_{\rho\nu}^\kappa - \Gamma_{\mu\nu}^\rho \Gamma_{\rho\lambda}^\kappa \quad (3.58)$$

Em outras palavras, considerando o vetor diretor $\xi^i(0)$ em um ponto P , e transportando paralelamente este vetor ao longo de um paralelogramo, formando uma curva fechada, como mostra a figura 4.2, a direção final, $(\xi^i(4))$, será diferente da inicial, $(\xi^i(0))$, se o manifold for curvo.



3.4 – Curvatura do manifold a partir de um paralelogramo. O vetor $\xi^i(0)$, no ponto P , em $t = 0$, é transportado paralelamente até o ponto $t = 1$ ao longo da geodésica W_g . Em seguida, é transportado paralelamente até os pontos $t = 2$, $t = 3$ e, fechando o paralelogramo, $t = 4$, retornando ao ponto inicial $t = 0$. Se o manifold for curvo, $\xi^i(4) \neq \xi^i(0)$ (adaptado de [86]).

Em um determinado ponto de um espaço Riemanniano é sempre possível escolher um sistema de coordenadas, chamadas *coordenadas normais de Riemann*, em que a conexão é nula. Porém, a conexão é nula em todos os pontos somente se o espaço for plano. Então, a condição necessária e suficiente para o espaço ser plano é $R_{\alpha\beta\gamma}^{\sigma} = 0$ [87].

No caso de superfícies de duas dimensões imersas em \mathbb{R}^3 , apenas quatro componentes do tensor de Riemann não são nulas e apenas uma é independente, que está relacionada com a curvatura intrínseca de Gauss pela equação,

$$K = \frac{R_{1212}}{g} \quad (3.59)$$

onde $R_{\lambda\alpha\beta\gamma} = g_{\lambda\sigma} R_{\alpha\beta\gamma}^{\sigma}$ e g é o determinante do tensor métrico [80]. Portanto, o tensor de curvatura de Riemann é uma generalização da curvatura de Gauss para espaços de n dimensões.

3.6 TENSOR DE CURVATURA DE RICCI E ESCALAR DE RICCI

O tensor de Ricci é obtido por uma contração do tensor de Riemann [68],

$$R_{\alpha\gamma} \equiv R_{\alpha\sigma\gamma}^{\sigma} \quad (3.60)$$

e o escalar de Ricci, por uma multiplicação do tensor de Ricci pelo tensor métrico contravariante $g^{\alpha\gamma}$,

$$R \equiv g^{\alpha\gamma} R_{\alpha\gamma} \quad (3.61)$$

ou ainda,

$$R = g^{\mu\nu} \left(\partial_\nu \Gamma_{\mu\lambda}^\lambda - \partial_\lambda \Gamma_{\mu\nu}^\lambda + \Gamma_{\mu\lambda}^\rho \Gamma_{\rho\nu}^\lambda - \Gamma_{\mu\nu}^\rho \Gamma_{\rho\lambda}^\lambda \right) \quad (3.62)$$

Para uma interpretação geométrica do tensor e do escalar de Ricci ver [68].

CAPÍTULO 4

CURVATURA NEMÁTICA

Texturas em cristais líquidos são imagens formadas quando uma amostra é analisada em um microscópio de luz polarizada. A microscopia de polarização é uma das ferramentas essenciais para a caracterização de novos materiais mesogênicos sintetizados, pois permite determinar a temperatura de transição de fase e caracterizar a fase através da investigação das texturas (que são dependentes da temperatura) entre polarizadores cruzados [91]. Algumas texturas (de diferentes fases) podem ser vistas na figura 4.1. Tais texturas são estudadas analiticamente pela configuração do vetor diretor, que pode ser descrito através de um sistema de coordenadas cartesianas, no referencial fixo de laboratório. Nesta tese será apresentada a caracterização geométrica da textura da fase nemática, usando a geometria Riemanniana.

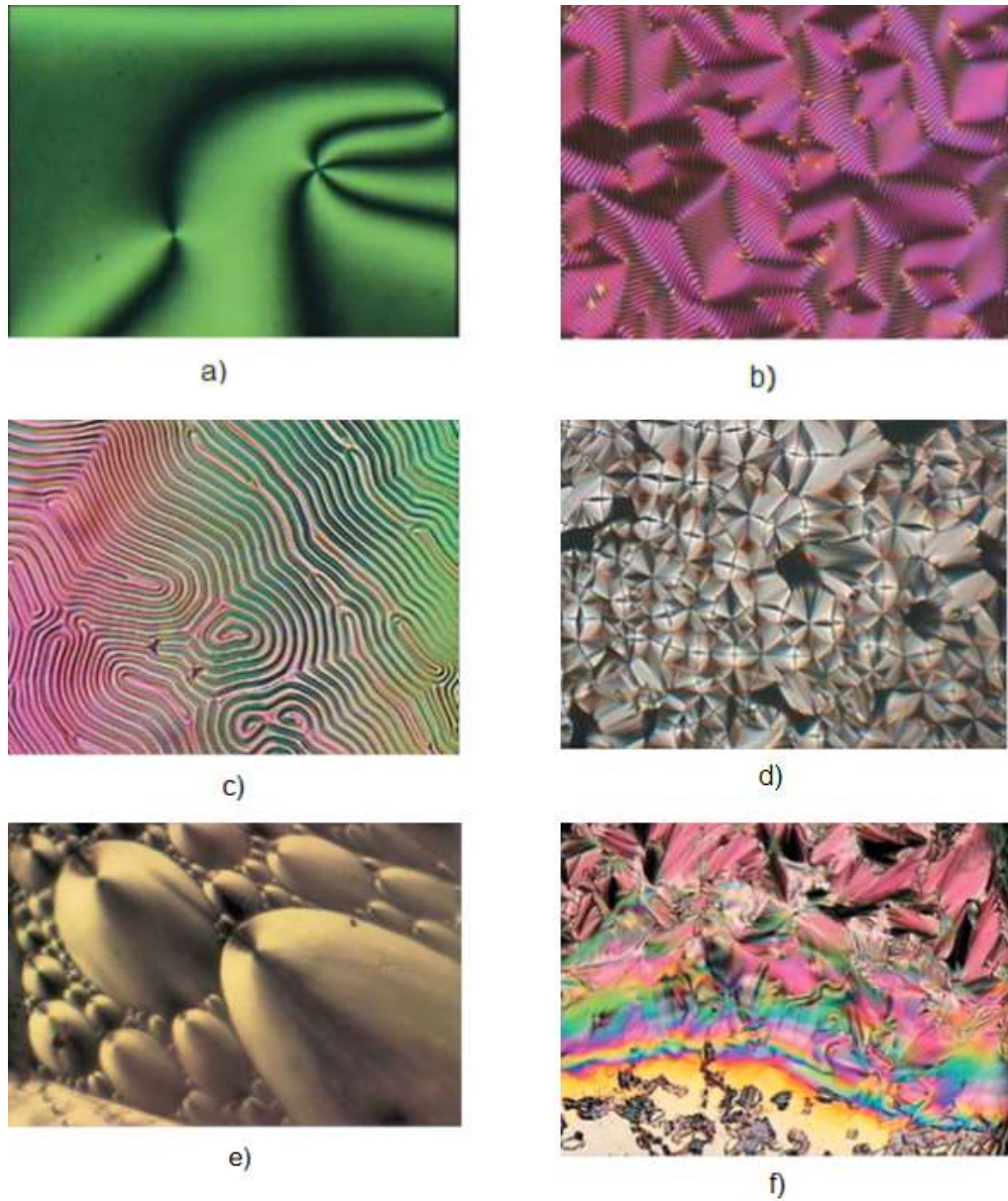


Figura 4.1 – Texturas em Cristais Líquidos. a) Textura Schlieren da fase nemática (trataremos apenas desta textura neste trabalho), b) Textura da fase colestérica com condição de ancoramento homeotrópico, c) Textura poligonal colestérica (impressão digital), d) Textura cônica focal, e) Textura poligonal da fase esméctica A, f) Textura natural de uma amostra com uma sequência de fases: N^* (baixo)- $TGBA^*$ (meio)- SmA^* (topo) sob um gradiente de temperatura [91].

4.1 MÉTRICA NEMÁTICA

De acordo com a teoria do contínuo dos cristais líquidos (Cap. 2), as componentes dos vetores diretores são escritas em termos da base canônica de um sistema de coordenadas cartesiano [4-6,8]. Significa que a direção do vetor diretor de uma molécula/micela e de suas vizinhas são obtidas trasladando o sistema de coordenadas em que as direções dos eixos da base não mudam.

Suponha que o vetor diretor \mathbf{n} seja escrito em uma base vetorial ortonormal fixa no laboratório, $(\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2, \mathbf{e}_3)$, de forma que os vetores que compõem esta base são independentes da posição, isto é,

$$\mathbf{n} = n^i \mathbf{e}_i = n_i \mathbf{e}^i \quad (4.1)$$

com a restrição,

$$n^i n_i = \delta_{ij} n^i n^j = \delta^{ij} n_i n_j = 1. \quad (4.2)$$

Como visto no capítulo 3, as componentes covariantes e contravariantes são iguais, $n^i = n_i$, devido aos eixos serem cartesianos e ortonormais.

A proposta que se apresenta nesta tese, consiste em supor que o espaço é Riemanniano em vez de Euclidiano. Com isto, o vetor diretor pertence a um espaço tangente de um manifold diferenciável de três dimensões e os espaços tangentes de pontos próximos são comparados via conexão de Levi-Civita, como discutido na seção 3.3. Obviamente, se o manifold for plano, caso em que o espaço Riemanniano equivale ao Euclidiano, a curvatura intrínseca é nula em todos os pontos da amostra.

Neste modelo, a curvatura intrínseca não é suficiente para descrever a fase nemática. Entretanto, o cálculo do *escalar de curvatura* de Ricci, definido na seção 3.6, permite a comparação com a energia elástica livre, definida na seção 2.4.

A abordagem feita aqui é semelhante à seguida por *Simões et al.* [92,93], especificamente, realiza-se uma mudança de coordenadas para analisar a amostra nemática. Na descrição de Oseen-Frank [4,5] a variação do diretor entre duas moléculas distantes Δs uma da outra, como mostra a figura 4.4, é feita considerando

que a distância entre os dois pontos infinitesimalmente próximos ds é dada pela relação (espaço cartesiano),

$$ds^2 = \delta_{ij} dx^i dx^j. \quad (4.3)$$

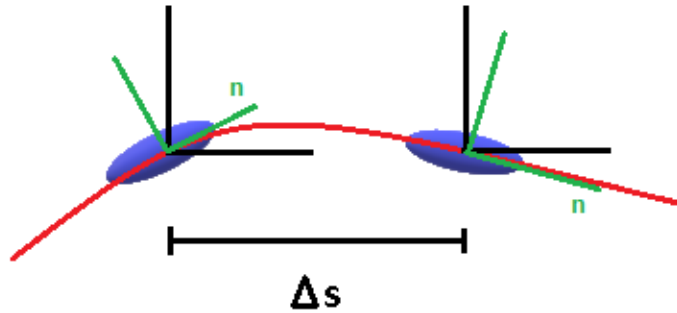


Figura 4.2 – Vetor diretor tangente a uma curva de um manifold. No referencial de laboratório (eixos de cor preta) os eixos da base são mantidos fixos quando transladamos de uma distancia Δs entre duas moléculas próximas, enquanto que as componentes do vetor diretor mudam de ponto a ponto. No sistema local das moléculas (eixos de cor verde) os eixos da base mudam de ponto a ponto de tal forma que o vetor diretor é sempre tangente a uma curva do manifold (representado pela linha em vermelho).

A essência da teoria apresentada neste trabalho está em considerar que os vetores diretores em cada ponto da amostra, são tangentes a uma família de curvas de um manifold de três dimensões com a métrica Riemanniana definida por,

$$ds^2 = g_{ij} dx^i dx^j \quad (4.4)$$

onde g_{ij} é o tensor métrico. Desta forma, o campo diretor é um *campo vetorial de vetores paralelos* ao longo de curvas $x^i(t)$. A condição que o campo diretor $n^i(x^j(t))$, deve satisfazer é [86],

$$\frac{Dn^i}{dt} = \frac{dn^i}{dt} + \Gamma_{kj}^i n^k \frac{dx^j}{dt} = 0 \quad (4.5)$$

onde Γ_{kj}^i é a conexão de Levi-Civita. Como o diretor n , coincide com o vetor tangente a curva dx^i/dt , as curvas são geodésicas.

Para construir a métrica, será adotado um sistema de coordenadas que acompanhe a geometria intrínseca do sistema. Consequentemente, as direções dos

eixos da base mudam de ponto a ponto. Inicialmente, escolhemos três vetores para compor a base, denotados por ξ_i . Além disso, fazemos uma destas direções, por exemplo, ξ_1 , coincidir com a direção do diretor \mathbf{n} em todos os pontos da amostra, ou seja,

$$\mathbf{n} = \xi_1 \quad (4.6)$$

Se existir curvatura intrínseca na amostra nemática, os vetores ξ_i mudam de ponto a ponto, isto é, $\xi_i(x^j)$, e se não, esses vetores são equivalentes aos vetores da base e_i . As transformações de coordenadas entre os dois sistemas é dada por,

$$\xi_i = \Lambda_i^j e_j \quad (4.7a)$$

$$\xi^i = \Lambda'^i_j e^j \quad (4.7b)$$

onde Λ_i^j e Λ'^i_j são as componentes das matrizes de rotação local, Λ , e,

$$e_i = \tilde{\Lambda}_i^j \xi_j \quad (4.8a)$$

$$e^i = \tilde{\Lambda}'^i_j \xi^j \quad (4.8b)$$

onde $\tilde{\Lambda}_i^j$ e $\tilde{\Lambda}'^i_j$ são as componentes das matrizes inversas, $\tilde{\Lambda}$.

Como a matriz de rotação Λ (na equação(4.7)) é simétrica, ela é diagonalizável [94], ou seja, existe uma matriz Q , construída pelos autovetores (em que cada coluna é construída pelas componentes de cada autovetor), tal que $Q^T \Lambda Q = D$, onde D é a matriz diagonal formada pelos autovalores associados à matriz Λ . Para que os vetores ξ_i sejam os autovetores associados à matriz Λ , ou seja, que sejam as direções principais, eles devem satisfazer a equação característica,

$$(\tilde{\Lambda}_i^j - \lambda_k \delta_i^j) \xi_k = 0 \quad (4.9)$$

onde fizemos $e_i = \lambda \xi_i$ na equação (4.8a). Na equação (4.9), o índice k foi inserido para distinguir os vetores associados aos respectivos autovalores e não devem ser somados pelo convenção de Einstein. Escrevendo em termos das componentes de cada autovetor, obtém-se três sistemas de três equações,

$$(\tilde{\Lambda}_i^j - \lambda_k \delta_i^j) \xi_k^i = 0 \quad (4.10)$$

Explicitamente,

$$\begin{cases} (\tilde{\Lambda}_1^1 - \lambda_1)\xi^1_1 + (\tilde{\Lambda}_2^1)\xi^2_1 + (\tilde{\Lambda}_3^1)\xi^3_1 = 0 \\ (\tilde{\Lambda}_1^2)\xi^1_1 + (\tilde{\Lambda}_2^2 - \lambda_1)\xi^2_1 + (\tilde{\Lambda}_3^2)\xi^3_1 = 0 \\ (\tilde{\Lambda}_1^3)\xi^1_1 + (\tilde{\Lambda}_2^3)\xi^2_1 + (\tilde{\Lambda}_3^3 - \lambda_1)\xi^3_1 = 0 \\ (\tilde{\Lambda}_1^1 - \lambda_2)\xi^1_2 + (\tilde{\Lambda}_2^1)\xi^2_2 + (\tilde{\Lambda}_3^1)\xi^3_2 = 0 \\ (\tilde{\Lambda}_1^2)\xi^1_2 + (\tilde{\Lambda}_2^2 - \lambda_2)\xi^2_2 + (\tilde{\Lambda}_3^2)\xi^3_2 = 0 \\ (\tilde{\Lambda}_1^3)\xi^1_2 + (\tilde{\Lambda}_2^3)\xi^2_2 + (\tilde{\Lambda}_3^3 - \lambda_2)\xi^3_2 = 0 \\ (\tilde{\Lambda}_1^1 - \lambda_3)\xi^1_3 + (\tilde{\Lambda}_2^1)\xi^2_3 + (\tilde{\Lambda}_3^1)\xi^3_3 = 0 \\ (\tilde{\Lambda}_1^2)\xi^1_3 + (\tilde{\Lambda}_2^2 - \lambda_3)\xi^2_3 + (\tilde{\Lambda}_3^2)\xi^3_3 = 0 \\ (\tilde{\Lambda}_1^3)\xi^1_3 + (\tilde{\Lambda}_2^3)\xi^2_3 + (\tilde{\Lambda}_3^3 - \lambda_3)\xi^3_3 = 0 \end{cases} \quad (4.11)$$

onde as propriedades do tensor delta de Dirac, δ_i^j , foram empregadas. A descrição dos cristais líquidos nemáticos uniaxiais exige que haja apenas uma direção preferencial, logo, os autovalores devem ser $\{1, r, r\}$ em que $\lambda_1 = 1$, corresponde ao vetor principal $\xi_1 = \mathbf{n}$, e $\lambda_2 = \lambda_3 = r$. Para determinar os coeficientes da matriz $\tilde{\Lambda}$ que satisfaça estas exigências, primeiramente, deve-se escrever a equação (4.10) da seguinte forma,

$$\tilde{\Lambda}_i^j \xi^i_k = \lambda_k \delta_i^j \xi^i_k \quad (4.12)$$

Em seguida aplica-se a propriedade do tensor delta $\delta_i^j \xi^i_k = \xi^j_k$,

$$\tilde{\Lambda}_i^j \xi^i_k = \lambda_k \xi^j_k \quad (4.13)$$

agora, substituindo os valores de λ e trocando a notação $\xi^i_1 = n^i$, $\xi^i_2 = p^i$ e $\xi^i_3 = q^i$, obtém-se,

$$\begin{aligned} \tilde{\Lambda}_i^j n^i &= n^j \\ \tilde{\Lambda}_i^j p^i &= r p^j \\ \tilde{\Lambda}_i^j q^i &= r q^j \end{aligned} \quad (4.14)$$

Como os vetores da base dual são ortogonais por definição, as seguintes relações são válidas:

$$\begin{aligned} n^i n_j &= \delta_j^i \\ p^i p_j &= \delta_j^i \\ q^i q_j &= \delta_j^i \end{aligned} \quad (4.15)$$

e podem ser usadas para expressar a equação (4.14) da seguinte forma,

$$\tilde{\Lambda}_i^j = n^j n_i + r(p^j p_i + q^j q_i) \quad (4.16)$$

desde que os vetores \vec{n} , \vec{p} e \vec{q} sejam ortogonais entre si. A equação 4.15 também pode ser escrita de forma,

$$n^i n_j + p^i p_j + q^i q_j = \delta_j^i. \quad (4.17)$$

ou ainda,

$$p^i p_j + q^i q_j = \delta_j^i - n^i n_j. \quad (4.18)$$

Substituindo a equação (4.18) na equação (4.17), encontramos a matriz de rotação,

$$\tilde{\Lambda}_i^j = r\delta_i^j + (1-r)n^j n_i. \quad (4.19)$$

A matriz inversa é obtida usando relação $\Lambda_i^j \tilde{\Lambda}_j^k = \delta_i^k$,

$$\Lambda_j^i = \frac{1}{r}\delta_j^i + \left(\frac{1-r}{r}\right)n^i n_j. \quad (4.20)$$

A mudança de coordenadas do sistema de laboratório para o sistema local ($x'^i = x'^i(x^j)$) deve ser feita usando a equação (3.33),

$$g_{ij} = \delta_{hk} \frac{\partial x'^h}{\partial x^i} \frac{\partial x'^k}{\partial x^j}. \quad (4.21)$$

Esta mudança de coordenadas consiste em encontrar a matriz de rotação local tal que se os vetores da base de laboratório fossem girados de ponto a ponto, um deles sempre coincide com a direção principal (direção do diretor) que representa a molécula uniaxial, portanto,

$$\frac{\partial x'^i}{\partial x^j} = \tilde{\Lambda}_j^i \quad (4.22)$$

com isto, o tensor métrico é,

$$g_{ij} = \delta_{hk} \tilde{\Lambda}_i^h \tilde{\Lambda}_j^k. \quad (4.23)$$

Substituindo a equação (4.19) na equação (4.23), resulta,

$$g_{ij} = a\delta_{ij} + (1-a)n_i n_j \quad (4.24)$$

onde $a = r^2$ e as relações dadas pela equação (4.2) foram utilizadas. Para a inversa,

$$g^{ij} = \frac{1}{a} \delta^{ij} + \frac{(1-a)}{a} n^i n^j. \quad (4.25)$$

A única restrição quanto aos autovalores é que $r \neq 0$ (caso contrário, $\tilde{\Lambda}_i^h$ não possui inversa), portanto, $a > 0$ (pois $a = r^2$). O escalar a está intimamente relacionado com o parâmetro de ordem e com a geometria das moléculas/micelas, portanto, caracteriza o alinhamento do sistema e, por consequência, sua anisotropia. A abordagem da métrica dada pela equação (4.24) em termos do parâmetro de ordem foi definida por *Simões et. al.* e coautores [92,93]. Entretanto, o parâmetro a aqui apresentado será usado de maneira distinta daqueles trabalhos, pois aqui, será associado à curvatura intrínseca do manifold e não à geometria intrínseca das moléculas, embora estejam relacionados. Com isto, se os três autovalores forem iguais ($r = 1$), ou seja, se $a = 1$, as moléculas formam um meio isotrópico e não há direção privilegiada. Neste caso, a equação (4.24) se reduz a $g_{ij} = \delta_{ij}$ em todos os pontos da amostra.

É fácil mostrar que a métrica que definimos está normalizada. Basta multiplicar a equação 4.24 por $n^i n^j$ e usar as relações dadas por (4.2) para obter $g_{ij} n^i n^j = 1$.

4.2 ESCALAR DE CURVATURA NEMÁTICO

Nesta seção, o objetivo é calcular o escalar de curvatura de Ricci, R , do manifold com a métrica definida pela equação (4.24) e (4.25). O escalar de Ricci é definido pela equação (3.62),

$$R = g^{jl} (\partial_l \Gamma_{ji}^i - \partial_i \Gamma_{jl}^i + \Gamma_{ji}^m \Gamma_{ml}^i - \Gamma_{jl}^m \Gamma_{mi}^i). \quad (4.26)$$

onde Γ_{jk}^i são os símbolos de Christoffel (equação (3.39)),

$$\Gamma_{jk}^i = \frac{1}{2} g^{im} \left(\frac{\partial g_{km}}{\partial x^j} + \frac{\partial g_{jm}}{\partial x^k} - \frac{\partial g_{jk}}{\partial x^m} \right). \quad (4.27)$$

Como a equação (4.27) envolve derivadas de primeira e de segunda ordem do tensor métrico g_{ij} , e este está em função do tensor métrico δ_{ij} , referente a outro sistema de coordenadas, a seguinte estratégia será usada para que o tensor δ_{ij} não apareça na expressão de R : primeiro calculamos a derivada de g_{ij} ,

$$\begin{aligned}\partial_k(g_{ij}) &= \partial_k(a\delta_{ij} + (1-a)n_in_j) \\ &= (\delta_{ij} - n_in_j)\partial_k(a) + (1-a)\partial_k(n_in_j)\end{aligned}\quad (4.28)$$

em seguida, isolamos o tensor δ_{ij} da equação (4.24),

$$\delta_{ij} = \frac{g_{ij} - (1-a)n_in_j}{a}\quad (4.29)$$

e substituímos na equação (4.28), resultando,

$$\partial_k(g_{ij}) = \left(\frac{g_{ij} - n_in_j}{a}\right)\partial_k(a) + (1-a)\partial_k(n_in_j).\quad (4.30)$$

O mesmo procedimento é feito para a derivada do tensor contravariante,

$$\partial_k(g^{ij}) = \left(\frac{n^in^j - g^{ij}}{a}\right)\partial_k(a) - \frac{(1-a)}{a}\partial_k(n^in^j).\quad (4.31)$$

Também foi empregada a convenção de escrever o escalar de curvatura apenas em termos de componentes contravariantes do vetor diretor. A fim de mudar a derivada da componente covariante para contravariante, deve-se usar a propriedade de subir índice dada pela equação (3.26),

$$\partial_j(n_i) = \partial_j(g_{ik}n^k)\quad (4.32)$$

e, desenvolvendo a derivada e usando a equação (4.30),

$$\partial_j(n_i) = \frac{1}{a}g_{ik}\partial_j(n^k) + \frac{(1-a)}{a}n_in^k\partial_j(n_k).\quad (4.33)$$

O ultimo termo à direita da equação (4.33) é nulo, em que a demonstração pode ser encontrada no *apêndice A*. Portanto,

$$\partial_j(n_i) = \frac{1}{a}g_{ik}\partial_j(n^k)\quad (4.34)$$

Desta forma, após muitas manipulações das quais envolvem mudanças de índice mudo e simplificações algébricas, obtêm-se o escalar de Ricci,

$$\begin{aligned}
R = & \frac{1}{a} \partial^i [\partial_i(a)] + \frac{1}{a} n^i \partial_i [n^j \partial_j(a)] - \frac{(1-a)}{a} \partial_i [n^i \partial_j(n^j) + n^j \partial_j(n^i)] - \\
& \frac{1}{a^2} \partial^i(a) \partial_i(a) + \frac{1}{2a^2} n^i n^j \partial_i(a) \partial_j(a) + \\
& \frac{(3a-1)}{a^2} n^j \partial_j(a) \partial_i(n^i) + \frac{1}{a} n^i \partial_i(n^j) \partial_j(a) - \\
& \frac{(1-a)^2}{2a^2} [\partial_i(n^j) \partial_j(n^i) - g_{jk} \partial^i(n^j) \partial_i(n^k) + n^i n^j g_{kl} \partial_i(n^k) \partial_j(n^l)].
\end{aligned} \tag{4.35}$$

A equação (4.35) pode ser expressa na forma vetorial usando-se as definições de derivada covariante definidas pelas equações (3.48), (3.51), (3.54) e (3.55). Além disso, o determinante da matriz definida pelo tensor g_{ij} é $g = a^2$, como pode ser visto no *Apêndice B* (observação: vale enfatizar que na equação (3.52) fazemos $\epsilon^{ijk} = (1/a)e^{ijk}$). Como exemplo deste procedimento, o divergente fica,

$$\nabla \cdot \mathbf{n} = \frac{1}{a} \partial_i (a n^i) \tag{4.36}$$

e, usando a regra da cadeia,

$$\nabla \cdot \mathbf{n} = \frac{1}{a} \mathbf{n} \cdot \nabla a + \partial_i (n^i). \tag{4.37}$$

Com isto, o termo $\partial_i (n^i)$ pode ser substituído por,

$$\partial_i (n^i) = \nabla \cdot \mathbf{n} - \frac{1}{a} \mathbf{n} \cdot \nabla a. \tag{4.38}$$

Como outro exemplo, o termo $\partial^i [\partial_i(a)]$ está relacionado com o Laplaciano. Para ver isto, calcula-se o Laplaciano,

$$\nabla^2 a = \nabla \cdot \nabla a = \frac{1}{a} \partial_i [a g^{ij} \partial_j(a)] \tag{4.39}$$

que, após varias manipulações algébricas, fica,

$$\begin{aligned}
\partial^i [\partial_i(a)] = & \nabla^2 a - \frac{1}{a^2} (\mathbf{n} \cdot \nabla a)^2 + (a-1) a^2 \nabla a \cdot [\mathbf{n} \times (\nabla \times \mathbf{n})] \\
& - \frac{(a-1)}{a} (\mathbf{n} \cdot \nabla a) \nabla \cdot \mathbf{n}
\end{aligned} \tag{4.40}$$

onde $n^i n^j \partial_i(a) \partial_j(a) = (\mathbf{n} \cdot \nabla a)^2$ e $n^i \partial_i(n^j) \partial_j(a) = -a^3 \nabla a \cdot [\mathbf{n} \times (\nabla \times \mathbf{n})]$, cuja demonstração está no *Apêndice C*.

Desta forma, cada termo da equação (4.35) pode ser substituído pela forma vetorial como segue,

$$\begin{aligned}
\partial^i[\partial_i(a)] &= \nabla^2 a - \frac{1}{a^2}(\mathbf{n} \cdot \nabla a)^2 + (a-1)a^2 \nabla a \cdot [\mathbf{n} \times (\nabla \times \mathbf{n})] \\
&\quad - \frac{(a-1)}{a}(\mathbf{n} \cdot \nabla a) \nabla \cdot \mathbf{n} \\
n^i \partial_i[n^j \partial_j(a)] &= \nabla \cdot (\mathbf{n}(\mathbf{n} \cdot \nabla a)) - (\mathbf{n} \cdot \nabla a) \nabla \cdot \mathbf{n} \\
\partial_i[n^i \partial_j(n^j) + n^j \partial_j(n^i)] &= \nabla \cdot (\mathbf{n}(\nabla \cdot \mathbf{n})) - a^3 \nabla \cdot [\mathbf{n} \times (\nabla \times \mathbf{n})] - \frac{1}{a} \nabla \cdot [\mathbf{n}(\mathbf{n} \cdot \nabla a)] \\
&\quad + \frac{2}{a^2}(\mathbf{n} \cdot \nabla a)^2 - \frac{1}{a}(\mathbf{n} \cdot \nabla a) \nabla \cdot \mathbf{n} - 2a^2 \nabla a \cdot [\mathbf{n} \times (\nabla \times \mathbf{n})] \\
-\frac{1}{a^2} \partial^i(a) \partial_i(a) + \frac{1}{2a^2} n^i n^j \partial_i(a) \partial_j(a) &= -(\mathbf{n} \times \nabla a)^2 - \frac{1}{2a^2}(\mathbf{n} \cdot \nabla a)^2 \\
n^j \partial_j(a) \partial_i(n^i) &= (\mathbf{n} \cdot \nabla a) \nabla \cdot \mathbf{n} - \frac{1}{a}(\mathbf{n} \cdot \nabla a)^2 \\
\partial_i(n^j) \partial_j(n^i) - g_{jk} \partial^i(n^j) \partial_i(n^k) + n^i n^j g_{kl} \partial_i(n^k) \partial_j(n^l) &= -a^4 [\mathbf{n} \cdot (\nabla \times \mathbf{n})]^2
\end{aligned} \tag{4.41}$$

e o resultado para o escalar de curvatura de Ricci na forma vetorial é,

$$\begin{aligned}
R &= \frac{1}{a} \nabla^2 a + \left[\frac{(-1+a)^2}{2} a^2 (\mathbf{n} \cdot (\nabla \times \mathbf{n}))^2 + \frac{(-1+a)}{a} \nabla \cdot (\mathbf{n}(\nabla \cdot \mathbf{n})) - \right. \\
&\quad \left. (-1+a)a^2 \nabla \cdot (\mathbf{n} \times (\nabla \times \mathbf{n})) \right] + \frac{1}{a^2} \nabla \cdot (\mathbf{n}(\mathbf{n} \cdot \nabla a)) - (\mathbf{n} \times \nabla a)^2 - \\
&\quad \frac{3a+4}{2a^3} (\mathbf{n} \cdot \nabla a)^2 + \frac{1}{a^2} (\mathbf{n} \cdot \nabla a) (\nabla \cdot \mathbf{n}) + a(1-2a) \nabla a \cdot (\mathbf{n} \times (\nabla \times \mathbf{n})).
\end{aligned} \tag{4.42}$$

Estes cálculos foram realizados de cinco formas diferentes, sendo quatro delas usando o software “*mathematica 11*” e a outra, de forma analítica que está disponível no site da referência [25]. Todos os resultados convergiram para a equação (4.42) assegurando que a expressão está correta.

Há muito que ser feito quanto à interpretação de cada termo desta equação. Contudo, este modelo pode ser aplicado a qualquer sistema anisotrópico uniaxial não se restringindo apenas aos cristais líquidos nemáticos uniaxiais. Entretanto, adotando algumas simplificações, é possível obter importantes conclusões a respeito da teoria dos cristais líquidos nemáticos uniaxiais, como será mostrado na próxima seção.

4.3 ENERGIA ELÁSTICA LIVRE EM TERMOS DO ESCALAR DE CURVATURA NEMÁTICO

O caso mais simples a considerar para o escalar de curvatura nemático, dado pela equação (4.42), é quando $a = \text{const.}$ (com $a \neq 1$). Neste caso,

$$R = \frac{(-1 + a)^2}{2} a^2 (\mathbf{n} \cdot (\nabla \times \mathbf{n}))^2 + \frac{(-1 + a)}{a} \nabla \cdot (\mathbf{n}(\nabla \cdot \mathbf{n})) - (-1 + a) a^2 \nabla \cdot (\mathbf{n} \times (\nabla \times \mathbf{n})). \quad (4.43)$$

O leitor interessado pode encontrar o cálculo detalhado de como a equação (4.43) foi obtida a partir da métrica definida pelas equações (4.24) e (4.25), no site da referência [25].

Comparando o escalar de curvatura de Ricci, dado pela equação (4.43), com a energia elástica livre, dada pela equação (2.9), nota-se que os termos splay e bend não aparecem na curvatura enquanto que os termos twist, saddle-splay e splay-bend aparecem. Portanto, como a curvatura não descreve todos os tipos de deformações, é possível separar a energia elástica livre em dois termos; um que contem os termos de curvatura, que denotaremos por R , e outro que contem os termos que não aparecem na curvatura, representados por G ,

$$f = \gamma R + G \quad (4.44)$$

onde γ é uma constante de proporcionalidade, que pode ser determinada a partir de um modelo microscópico considerando as interações moleculares entre as moléculas.

Como demonstrado por Euler [95], as geometrias formadas pelo cilindro e pelo cone são as únicas isômeras ao plano. Isto implica que a curvatura de Gauss é nula para estas geometrias e, conseqüentemente, o escalar de Ricci. Analisando a figura 2.5, vemos que a distorção splay forma um cone tridimensional e o termo bend gera um cilindro tridimensional (prolongando as distribuições do diretor), como esquematizamos nas figuras 4.3 e 4.4. Um dos resultados apresentados neste trabalho é que estes termos formam distorções extrínsecas na amostra, ou seja, a curvatura destas deformações é indistinguível da geometria plana.



Figura 4.3 – Deformação Splay. Quando os vetores diretores são tangentes à superfície de um cone, a curvatura é nula, pois o cone é isômero ao plano. Entretanto, a energia elástica livre f não é nula devido ao termo splay, não nulo.



Figura 4.4 – Deformação Bend. Quando os vetores diretores são tangentes à superfície de um cilindro, a curvatura é nula, pois o cilindro é isômero ao plano. Entretanto, a energia elástica livre f não é nula devido ao termo bend, não nulo.

O principal resultado que apresentamos nesta tese decorre da comparação dos termos da energia elástica livre com os termos do escalar de curvatura. Rearranjando os termos da equação (2.9), temos,

$$F_{NS} = \frac{1}{2}K_{11}(\nabla \cdot \mathbf{n})^2 + \frac{1}{2}K_{33}(\mathbf{n} \times \nabla \times \mathbf{n})^2 + \frac{1}{2}K_{22}(\mathbf{n} \cdot \nabla \times \mathbf{n})^2 - (K_{22} + K_{24} - K_{13})\nabla \cdot [\mathbf{n}(\nabla \cdot \mathbf{n})] - (K_{22} + K_{24})\nabla \cdot (\mathbf{n} \times \nabla \times \mathbf{n}). \quad (4.45)$$

Comparando com os termos da curvatura, dados pela equação (4.43), obtém-se,

$$\begin{aligned}
\frac{1}{2}K_{22} &= \gamma \frac{(-1+a)^2}{2} a^2 \\
-(K_{22} + K_{24} - K_{13}) &= \gamma \frac{(-1+a)}{a} \\
-(K_{22} + K_{24}) &= -\gamma(-1+a)a^2.
\end{aligned} \tag{4.46}$$

Resolvendo para as constantes elásticas,

$$\begin{aligned}
K_{22} &= \gamma(-1+a)^2 a^2 \\
K_{24} &= \gamma(-1+a)(2-a)a^2 \\
K_{13} &= \gamma \frac{(-1+a)(1+a^3)}{a}
\end{aligned} \tag{4.47}$$

onde $a \neq 1$. Calculando as razões entre as constantes dadas pelas equações (4.47),

$$\begin{aligned}
\frac{K_{13}}{K_{22}} &= \frac{(1+a^3)}{(-1+a)a^3} \\
\frac{K_{24}}{K_{22}} &= \frac{(2-a)}{(-1+a)} \\
\frac{K_{24}}{K_{13}} &= \frac{(2-a)a^3}{(1+a^3)}
\end{aligned} \tag{4.48}$$

é evidente que se conhecermos o valor de uma destas constantes, através de um modelo microscópico, as outras duas estarão determinadas. Portanto, a descrição dos cristais líquidos nemáticos uniaxiais pela teoria do contínuo pode ser reduzida de cinco constantes elásticas para apenas três.

É importante enfatizar que as relações dadas pela equação (4.48) foram obtidas através da mudança de coordenadas de laboratório para coordenadas locais. Este fenômeno é análogo ao princípio da equivalência de Einstein da relatividade geral [70], em que um observador na Terra descreve um elevador em queda livre com uma aceleração g , enquanto que para outro observador dentro do elevador, nenhuma aceleração é percebida.

CAPÍTULO 5

CONSIDERAÇÕES FINAIS E PERSPECTIVAS FUTURAS

Neste trabalho, vimos que as deformações elásticas de uma amostra nemática uniaxial podem ser atribuídas à curvatura de um manifold de três dimensões. Esta descrição foi possível graças à construção de uma métrica nemática a partir de considerações geométricas. Como resultado, a energia livre possui termos que dependem da curvatura, que são os termos twist, saddle-splay e splay-bend e termos que não podem ser escritos em termos desta curvatura, que são os termos bend e splay. Nas figuras 4.3 e 4.4 apresentamos uma explicação geométrica do porque estes termos não aparecem na curvatura. Explicitamente, o termo bend está relacionado com a geometria de um cilindro e o termo splay, com a geometria do cone, cujas curvaturas intrínsecas são nulas.

Além disso, a comparação dos termos da energia livre com o escalar de curvatura nemático permite relacionar as constantes elásticas dos termos twist, saddle-splay e splay-bend de tal forma que, se conhecermos uma delas através de um modelo microscópico, as outras duas estarão determinados, reduzindo o número de constantes elásticas necessárias para descrever os cristais líquidos nemáticos uniaxiais de cinco para apenas três.

A teoria aqui apresentada é bastante recente e permite inúmeras investigações futuras. Uma delas consiste em construir um modelo microscópico que relaciona o parâmetro a com a geometria das moléculas. É evidente que a é função do parâmetro de ordem e , conseqüentemente, da temperatura. Além disso, há muito que ser feito quanto a interpretação dos termos da curvatura que envolvem o gradiente deste parâmetro, já que neste trabalho foi considerado que a é constante.

Outras investigações podem ser feitas na tentativa de relacionar os termos que não aparecem na curvatura, splay e bend, com o parâmetro a . Isto reduziria o número de constantes elásticas necessárias para descrever os cristais líquidos nemáticos uniaxiais para apenas uma constante elástica.

Para finalizar, é importante frisar que o modelo apresentado nesta tese pode ser aplicado a qualquer sistema anisotrópico uniaxial, por exemplo, ao campo gravitacional, não se restringindo aos cristais líquidos.

APÊNDICES

APÊNDICE A – Demonstração de $n^i \partial_j(n_i) = 0$

Para demonstrar que $n^i \partial_j(n_i) = 0$, usamos as formas equivalentes de escrever o produto escalar, juntamente com a condição de normalização,

$$n^i n_i = g_{ij} n^i n^j = g^{ij} n_i n_j = 1. \quad (B.1)$$

Primeiramente, considere a igualdade,

$$g_{ij} n^i n^j = 1. \quad (B.2)$$

Derivando a equação (B.2), obtemos,

$$\partial_k(g_{ij} n^i n^j) = \partial_k(1) \quad (B.3)$$

desenvolvendo, temos

$$n^i n^j \partial_k(g_{ij}) + g_{ij} n^j \partial_k(n^i) + g_{ij} n^i \partial_k(n^j) = 0. \quad (B.4)$$

Usando a equação (4.21), ou seja,

$$\partial_k(g_{ij}) = \left(\frac{g_{ij} - n_i n_j}{a} \right) \partial_k(a) + (1 - a) \partial_k(n_i n_j) \quad (B.5)$$

e substituindo em (B.4), obtemos,

$$\begin{aligned} n^i n^j \left[\left(\frac{g_{ij} - n_i n_j}{a} \right) \partial_k(a) + (1 - a) \partial_k(n_i n_j) \right] + g_{ij} n^j \partial_k(n^i) + g_{ij} n^i \partial_k(n^j) &= 0 \\ \left(\frac{g_{ij} n^i n^j - n_i n_j n^i n^j}{a} \right) \partial_k(a) + (1 - a) n^i n^j \partial_k(n_i n_j) + g_{ij} n^j \partial_k(n^i) + g_{ij} n^i \partial_k(n^j) &= 0 \end{aligned} \quad (B.6)$$

Pela equação (B.1), vemos que $g_{ij} n^i n^j - n_i n_j n^i n^j = 0$. Portanto,

$$\begin{aligned} (1 - a) n^i n^j \partial_k(n_i n_j) + g_{ij} n^j \partial_k(n^i) + g_{ij} n^i \partial_k(n^j) &= 0 \\ (1 - a) n^i n^j [n_j \partial_k(n_i) + n_i \partial_k(n_j)] + g_{ij} n^j \partial_k(n^i) + g_{ij} n^i \partial_k(n^j) &= 0 \quad (B.7) \\ (1 - a) [n^i \partial_k(n_i) + n^j \partial_k(n_j)] + n_i \partial_k(n^i) + n_j \partial_k(n^j) &= 0 \end{aligned}$$

onde usamos a equação (B.1) novamente e, também, a propriedade de baixar índice do tensor métrico. Rearranjando os termos e mudando o índice mudo, temos,

$$n_i \partial_j(n^i) = -(1 - a) n^i \partial_j(n_i). \quad (B.8)$$

Agora, usamos a igualdade,

$$n^i n_i = 1. \quad (B.9)$$

Derivando,

$$\begin{aligned} \partial_j(n^i n_i) &= \partial_j(1) \\ n_i \partial_j(n^i) + n^i \partial_j(n_i) &= 0 \\ n_i \partial_j(n^i) &= -n^i \partial_j(n_i) \end{aligned} \quad (B.10)$$

substituindo na equação (B.8),

$$-n^i \partial_j(n_i) = -(1 - a)n^i \partial_j(n_i) \quad (B.11)$$

e rearranjando os termos,

$$a n^i \partial_j(n_i) = 0. \quad (B.12)$$

Como $a \neq 0$, $n^i \partial_j(n_i) = 0$ e $n_i \partial_j(n^i) = 0$ (pela equação (B.10)), como queríamos demonstrar.

APÊNDICE B – Determinante de g_{ij}

A métrica nemática é dada por,

$$g_{ij} = a\delta_{ij} + (1 - a)n_i n_j. \quad (C.1)$$

Explicitando os termos de g_{ij} em forma matricial,

$$[g_{ij}] = \begin{bmatrix} a + (1 - a)(n_1)^2 & (1 - a)n_1 n_2 & (1 - a)n_1 n_3 \\ (1 - a)n_1 n_2 & a + (1 - a)(n_2)^2 & (1 - a)n_2 n_3 \\ (1 - a)n_1 n_3 & (1 - a)n_2 n_3 & a + (1 - a)(n_3)^2 \end{bmatrix} \quad (C.2)$$

desenvolvendo o determinante, g , e rearranjando termos, obtemos,

$$g = a^3 + (1 - a)a^2[(n_1)^2 + (n_2)^2 + (n_3)^2] \quad (C.3)$$

como \mathbf{n} é unitário, $(n_1)^2 + (n_2)^2 + (n_3)^2 = 1$, e,

$$g = a^2. \quad (C.4)$$

APÊNDICE C – Demonstração de $n^i \partial_i (n^j) \partial_j (a) = -a^3 \nabla a \cdot [\mathbf{n} \times (\nabla \times \mathbf{n})]$

Inicialmente calculamos a componente i do rotacional usando a equação (3.54),

$$(\nabla \times \mathbf{n})^i = \frac{1}{a} e^{ijk} \partial_j (n_k) \quad (D.1)$$

Para calcular $\mathbf{n} \times (\nabla \times \mathbf{n})$, fazemos $B^i = (\nabla \times \mathbf{n})^i$ e calculamos $\mathbf{n} \times \mathbf{B}$,

$$(\mathbf{n} \times \mathbf{B})^i = \frac{1}{a} e^{ijk} n_j B_k \quad (D.2)$$

Como, $B_k = g_{kl} B^l = g_{kl} (\nabla \times \mathbf{n})^l$, temos,

$$(\mathbf{n} \times (\nabla \times \mathbf{n}))^i = \frac{1}{a} e^{ijk} n_j g_{kl} (\nabla \times \mathbf{n})^l$$

Usando a equação (D.1),

$$(\mathbf{n} \times (\nabla \times \mathbf{n}))^i = \frac{1}{a^2} n_j g_{kl} (e^{ijk} e^{lmh}) \partial_m (n_h) \quad (D.3)$$

Usando a identidade [80],

$$e^{ijk} e_{rst} = \delta_{rst}^{ijk} = \begin{vmatrix} \delta_r^i & \delta_s^i & \delta_t^i \\ \delta_r^j & \delta_s^j & \delta_t^j \\ \delta_r^k & \delta_s^k & \delta_t^k \end{vmatrix} \quad (D.4)$$

Podemos escrever,

$$(\mathbf{n} \times (\nabla \times \mathbf{n}))^i = \frac{1}{a^2} n_j g_{kl} g^{lr} g^{ms} g^{ht} (\delta_{rst}^{ijk}) \partial_m (n_h) \quad (D.5)$$

Onde usamos $e^{lmh} = g^{lr} g^{ms} g^{ht} e_{rst}$ e δ_{rst}^{ijk} é o determinante da matriz na equação (D.4). Após várias manipulações algébricas, obtemos,

$$(\mathbf{n} \times (\nabla \times \mathbf{n}))^i = -\frac{1}{a^3} n^j \partial_j (n^i) \quad (D.6)$$

como queríamos demonstrar.

REFERÊNCIAS

- [1] OSEEN, C.W., *Trans. Faraday Soc.* 29, 883 (1993).
- [2] SADD M.H., *Elasticity: Theory, Applications, and Numerics*, 2^a ed., Academic Press, (2009).
- [3] de GENNES P. G., PROST J., *The Physics of Liquid Crystals*, Clarendon Press, Oxford, 2^a ed., (1993).
- [4] ISRAELACHVILI J.N., *Intermolecular and surface forces*, 3^a ed., Academic Press, (2011).
- [5] FRANK, F. C., *Discuss. Faraday Soc.* 25, 19 (1958).
- [6] FAETTI M., FAETTI S., *Physical Review E* 57, 6, (1998).
- [7] BARBERO G., EVANGELISTA L. R., *An elementary course on the continuum theory for nematic liquid crystals*, World Scientific (2001).
- [8] NEHRING J., SAUPE A., *J. Chem. Phys.* 54, 337 (1971); 56, 5527 (1972).
- [9] OLDANO C., BARBERO G., *J. Phys. (Paris) Lett.* 46, 451 (1985).
- [10] OLDANO C., BARBERO G., *Phys. Lett.* 110A, 213 (1985).
- [11] BARBERO G., OLDANO C., *Nuovo Cimento D* 6, 479 (1985).
- [12] STALLINGA S., VERTOGEN G., *Physical Review E*, 53, 1692 (1996).
- [13] ALLEN M. P., FRENKEL D., *Physical Review A*, 37, R1813 (1988).
- [14] OSIPOV M. A., HESS S., *Liquid Crystals* 16, 845 (1994).
- [15] VERTOGEN G., FLAPPER S. D., DULLEMOND C., *J. Chem. Phys.* 76, 616 (1982).
- [16] VERTOGEN G., *Phys. Lett.* A89, 448 (1983).
- [17] VERTOGEN G., *Physica A*117, 227 (1983).
- [18] OSIPOV M. A., HESS S., *Mol. Phys.* 78, 1191-1201 (1993).
- [19] OSIPOV M. A., HESS S., *Chem. Phys.* 99, 4181-4190 (1993).
- [20] CHEN G. P., TAKEZOE H., FUKUDA A., *Liquid crystals*, 5, 341 (1989).
- [21] De JEU W. H., CLAASSEN W. A. P., SPRUIJT M. J., *Mol. Cryst. Liq. Cryst.* 37, 269 (1976).
- [22] MUDHUSUDANA N. V., KARAT P. P., CHANDRASEKHAR S., PRAMANĀ, suppl n. 1, 225 (1975).
- [23] GRULER H., SHEFTER T. J., MEIER G., *Z. Naturforsch.* 27 a, 966 (1972).
- [24] SCHARKOWSKI S., SCHMIEDEL H., SRANNARIUS R., WEISHUHN E., *Z. Naturforsch.* 45a, 942 (1990).

- [25] <https://sites.google.com/site/nematiccurvature/curvature.pdf>
- [26] TSCHERSKE C., *Liquid Crystals: Materials Design and Self-Assembly*, Springer, New York, (2012).
- [27] RAMAMOORTHY A., *Thermotropic Liquid Crystals: Recent Advances*, Springer, The Netherlands, (2007).
- [28] FIGUEIREDO A. M., SALINAS S.R., *The physics of lyotropic liquid crystals: phase transitions and structural properties*, Oxford University Press, New York, (2005).
- [29] SCHENNING A., CRAWFORD G. P., BROER. D. J., *Liquid Crystals Sensors*, CRC Press, New York, 2017.
- [30] VAINSHTEIN B. K., CHISTYAKOV I. G., KOSTERIN E. A., CHAIKOVSKII V. M. 8, 457-470 (1969).
- [31] BEZRODNA T., MELNYK V., VOROBYEV V., PUCHKOVSKA G., *Journal of Luminescence* 130, 7, 1134-1141 (2010).
- [32] SHINODA T., MAEDA Y., ENOKIDO H., *The Journal of Chemical Thermodynamics* 6, 921-934 (1974).
- [33] SAW T.B. and co-authors, *Nature* 544, 212-216 (2017).
- [34] SAUTINA N. V., SITDIKOVA K. I., GALYAMETDINOV Y. G., *Russian Journal of Applied Chemistry*, 87, 4, 419-423 (2014).
- [35] MAKINO S., YAMAUCHI Y., SUGIMOTO W., *Journal of Power Sources*, 227, 153-160 (2013).
- [36] JAIN S., YADAV P., SWAMI R., SWAJAIN S., YADAV P., SWAMI R., SWANAKAR N. K., KUSHWAH V., KATIYAR S. S., *AAPS Pharm Sci Tech*, 19, 4, 1699-1711 (2018).
- [37] FRIEDEL G., *Annales de Physique* 18, 273 (1922).
- [38] [http://photonicswiki.org/index.php?title=Classification_and_Examples_of_Liquid_Crystals]
- [39] BLINOV L. M., *Structure and Properties of Liquid Crystals*, Springer, New York, (2011).
- [40] DUNMUR D., SLUCKIN T., *Soap, science, & flat-screen tvs: a history of liquid crystals*, Oxford, (2011).
- [41] CHANDRASEKHAR S., SADASHIVA B. K., SURESH K. A., *Promana* 9, 471 (1977).

- [42] HEWWMANN-SCHONHERR O., WENDORF J. H., RINGS DORF H. , TSCHIMER P., *Makromol. Chem., Rapid Commun* 7, 791-796 (1986).
- [43] NIORI T., SEKINE T., WATANABE J., FURUKAWA T., TAKEZOE H., *J. Mater. Chem.* 6,1231-1233 (1996).
- [44] JANBON S., DAVEY R.J., SHANKLAND K., *The Royal Society of Chemistry*, 10, 279-282 (2008).
- [45] BANSKA O.J., and co-authors, *Biopolymers* 95, n° 6, 365-375 (2010).
- [46] STEWART I. W., *The static and dynamic continuum theory of liquid crystals: a mathematical introduction*, Taylor and Francis, New York, (2004).
- [47] MUELLER M., *Fundamentals of quantum chemistry: molecular spectroscopy and modern electronic structure computations*, Kluwer Academic, New York (2002).
- [48] Kirov N., Simova P., *Spectrochimica Acta*, Vol. 29^a, 55-62 (1973).
- [49] BULKIN B. J., PROCHASKA F. T., *The Journal of Chemical Physics*, 54, 635-639 (1971).
- [50] BROWN G. H., *Advances in liquid crystals*, vol 2, Academic Press, New York, (1976).
- [51] OSWALD P., PIERANSKI P., *Nematic and cholesteric liquid crystals: concepts and physical properties*, Taylor & Francis, (2005).
- [52] CHANDRASEKHAR S., *liq. Cryst.* 14, 3-14 (1993).
- [53] CLADIS P. E., GUILLON D., BOUCHET F. R., FINN P. L., *Phys. Rev. A*, 23, 2594-2601 (1981).
- [54] MADSEN L. A., DINGEMANS T. J., NAKATA M., SAMULSKI E. T., *Phys. Rev. Lett.* 92, 145505 (2004).
- [55] ACHARYA B. R., PRIMAK A., KUMAR S., *Phys. Rev. Lett.* 92, 145506 (2004).
- [56] ARCHBOLD C. T., DAVIS E. J., MANDLE R. J., COWLING S. J., GOODBY J. L., *Soft Matter* 11, 7547-7557 (2015).
- [57] ZEP A., AYA S., AIHARA K., EMA K., POCHIECHA D., MADRAK K., BEMATOWICZ P., TAKEZOE H., GORECKA E., *J. Mater. Chem. C* 1, 46-49 (2013).
- [58] JEN S., CLARCK N. A., PERSHAN P. S. PRIESTLEY E. B., *Journal of Chemical Physics* 66, 4635 (1977).

- [59] PRASAD S. N., VENUGOPALAN, *The Journal of Chemical Physics* 75, 3033 (1981).
- [60] NASTISHIN Y. A., LIU H., SCHNEIDER T., NAZARENKO V., VASYUTA R., SHIYANOVSKII S. V., LAVRETOVICH O. D., *Physical Review E* 72, 041711 (2005).
- [61] GAY J. G., BERNE B. J., *J. Chem. Phys.* 74, 3316 (1981).
- [62] DUNMUR D. A., *Liquid Crystals: Fundamentals*, World Scientific, (2002).
- [63] GREUB W. H., *Linear Algebra*, 3rd ed., Springer-Verlag New York Inc, Toronto (1967).
- [64] FLEISCH D.A., *A student's guide to Vectors and Tensors*, Cambridge University Press, (2012).
- [65] WILSON P. M. H., *Curved Spaces:from classical geometries to elementar differential geometry*, 1st. Ed., Cambridge University Press, (2008).
- [66] BORISENKO A.I., TARAPOV I.E., *Vector and Tensor Analysis with applications*, Dover Publications Inc., New York, (1968).
- [67] WEINBERG S., *Gravitation and Cosmology: Principles and applications of the general theory of relativity*, John Wiley & Sons, New York, (1972).
- [68] RICCI G.M.M., LEVI-CIVITA T., *Méthodes de calcul defférentiel absolu et leurs applications*, *Mathematische Annalen*, Springer, 54, 125-201(1900).
- [69] EINSTEIN A., *Annalen der Physik*, 17, 891-921 (1905).
- [70] EINSTEIN A., *Jahrbuch der Radioaktivität*, 4, 411–462 (1907).
- [71] JÉRÔME B., *Rep. Prog. Phys.* 54, 391-451 (1991).
- [72] CRAWFORD G. P., ZUMER S., *Liquid Crystals in Complex Geometries: formed by polymer and porous networks*, Taylor & Francis, London (1996).
- [73] NIE X., LU R., XIANYU H., WU T. X., WU S.T., *Journal of Applied Physics* 101, 103110 (2007).
- [74] HEGDE G., KOMITOV L., *Journal of Applied Physics* 96, 113503 (2010).
- [75] WARNER M., MOSTAJERAN C., *Proc. R. Soc. A* 474, 20170566 (2018).
- [76] NAPOLI G., VERGORI L., *Physical Review E* 85, 061701 (2012).
- [77] NAPOLI G., VERGORI L., *International Journal of Non-Linear Mechanics* 49, 66-71 (2013).
- [78] KRALJ S., ROSSO R., VIRGA E. G., *the Royal Society of Chemistry* 7, 670-683 (2011).

- [79] PRESSLEY A., *Elementary Differential Geometry*, Springer, (2001).
- [80] HEINBOCKEL J.H., Introduction to tensor calculus and continuum mechanics, Department of mathematics and statistics Old Dominion University, (1996).
- [81] GAUSS C. F., SOCIETATI REGIAE OBLATAE, Tom. VI, 99-146 (1828).
- [82] GRAY A., ABBENA E., SALAMON S., *Modern Differential Geometry of Curves and Surfaces with Mathematica*, 3 ed., Taylor & Francis, New York, (2006).
- [83] RIEMANN B., *Nature* Vol VIII. Nos. 183, 184, pp 14-17, 36, 37 (1873).
- [84] GÖCKELER M., SCHÜCKER T., *Differential Geometry, gauge theories, and gravity*, Cambridge University Press, New York, (1987).
- [85] ISHAM C. J., *Modern Differential Geometry for Physicists*, 2nd. Ed., World Scientific, (2001).
- [86] LAUGWIZ D., *Bernhard Riemann 1826-1866: Turning Points in the Conception of Mathematics*, Birkhäuser, Boston, (2008).
- [87] CHRISTOFFEL, E.B., *Journal für die reine und angewandte Mathematik*, 70, 46–70 (1869).
- [88] NAKAHARA M., *Geometry, Topology and Physics*, 2nd. Ed., IOP, Bristol and Philadelphia, (2003).
- [89] WEINBERG S., *Gravitation and Cosmology: Principles and applications of the general relativity*, John Wiley & Sons, New York, (1972).
- [90] DALARSSON M., DALARSSON N., *Tensor Calculus, Relativity and Cosmology – A First Course*, Elsevier Academic Press, (2005).
- [91] DIERKING I., *Textures of Liquid Crystals*, Wiley-VCH, (2003).
- [92] SIMÕES M., PAZETTI M., *EPL*, 92 (2010).
- [93] SIMÕES M. CAMPOS A. BARBATO D., *Physical Review E*, 75, (2007).
- [94] GREUB W. H., *Linear Algebra*, 3 nd. Ed., Springer-Verlag, New York, (1967).
- [95] EULER L., *Novi Commentarii academiae scientiarum Petropolitanae* 16, 3-34 (1772).

Curvature of the elastic deformations in a nematic sample

M. Simões^a, W. Bertolino, and T. Davinicy

Universidade Estadual de Londrina, Departamento de Física, Campus Universitário, 86051-990 - Londrina (PR), Brazil

Received 25 June 2018 and Received in final form 11 December 2018

Published online: 16 May 2019

© EDP Sciences / Società Italiana di Fisica / Springer-Verlag GmbH Germany, part of Springer Nature, 2019

Abstract. In this work we study the geometry of the elastic deformations of the uniaxial nematic liquid crystals at the bulk. We will show that, at this region of the sample, the elastic terms of the free energy can be separated as the sum of two kinds of elastic deformations, the first is proportional to the Gaussian curvature obtained from the director field of a three-dimensional nematic sample and the second is composed by those terms that cannot be expressed as resulting from this curvature. To achieve these results we will construct the metric of an uniaxial nematic sample using the fact that the director gives the direction of the anisotropy of the system. With this approach we will give analytical and geometrical arguments to show that the elastic terms determined by K_{22} , K_{13} and K_{24} are contained in a curvature term, while the terms fixed by the splay elastic term, K_{11} , and the bend elastic term, K_{33} , are not. The novelty here is that while K_{13} and K_{24} do not contribute the bulk elastic energy of a nematic sample, they have an important contribution to the curvature of the system.

1 Introduction

One of the classical problems of Liquid Crystals (LCs) physics is the geometrical characterization of the elastic deformations of the director field in a nematic liquid crystal (NLC) sample [1]. Every LCs textbook reproduces the classical splay, bend and twist elastic deformations [1, 2]. Nevertheless, there are also other two elastic deformations, splay-bend and saddle-splay. But, as their elastic energy can be integrated and considered as surface effects, their geometrical characterization at the bulk seems to be not relevant and all that we found in the literature is the study of their anchoring properties, especially the Oldano-Barbero paradox [3–16]. The aim of this paper is to use the mathematical concept of curvature to give a geometrical characterization to these elastic constants.

If it is assumed that the director variations are small, proportional up to second order to \vec{n} and $\partial\vec{n}$ and satisfy the symmetry $\vec{n} \longleftrightarrow -\vec{n}$, then it is possible to show that the elastic free energy density given by [17–21],

$$F_e = f_0 + \frac{K_{11}}{2} (\vec{\nabla} \cdot \vec{n})^2 + \frac{K_{22}}{2} (\vec{n} \cdot \vec{\nabla} \times \vec{n})^2 + \frac{K_{33}}{2} (\vec{n} \times \vec{\nabla} \times \vec{n})^2 + K_{13} \nabla \cdot (\vec{n} (\vec{\nabla} \cdot \vec{n})) - (K_{22} + K_{24}) \nabla \cdot (\vec{n} (\vec{\nabla} \cdot \vec{n}) + \vec{n} \times \vec{\nabla} \times \vec{n}), \quad (1)$$

can be attributed to the director elastic deformation, where K_{11} , K_{22} , K_{33} , K_{13} and K_{24} are the elastic constants quantifying the five kinds of elastic deformations usually found in NLCs, known, respectively, as splay, twist, bend, splay-bend and saddle-splay elastic deformations [16–21], f_0 is an additive constant. Due to the simplicity of the arguments leading to eq. (1) and the importance of the knowledge of F_e , the determination of the elastic constants values was subject to intense research [12, 22–35].

The physical and mathematical fundamentals of this work can be understood when it is realized that there is a profound conceptual connection between LCs anisotropies and a metric space; LCs are anisotropic materials in which the director field \vec{n} gives the direction of the position-dependent anisotropies of the sample and the scalar order parameter S measures the intensity of such anisotropy. Usually, the values assumed by \vec{n} and S are obtained throughout the study of the invariants obtained from the tensorial order parameter Q_{ij} [1]. Nevertheless, there is another possible approach: when a physical measurement is direction dependent we can incorporate this anisotropy in a metric space. In many areas of physics this is the usual approach to deal with anisotropies [36] but it is not frequent in LCs studies. In fact, there are papers on LCs that use the same mathematical tools that we will use here, see for example [37–43]. This use is not done in the name of a sterile mathematical elegance but, mainly, because in using it we can achieve a new comprehension on the physical phenomena of the nematic director configuration and, as

^a e-mail: simoes@uel.br

we will see here, with it we can propose new geometrical properties for the nematic elastic deformations that, otherwise, would remain hidden. For example, approaches similar to the one that will develop here are found on studies of nematics under constrained geometries induced by boundary conditions or by two-dimensional surfaces (2D). We will not impose any of these restrictions here, we will consider three-dimensional (3D) samples without taking into account the restrictions imposed by the container geometry [42, 43]. Furthermore, it must be always remembered that when we pass from 2D to 3D the number of additional terms to be considered is discouraging huge and the fact that our paper faces this problem is one of the reasons why it is relevant. Of course, some of these constrained problems can be also considered with the approach developed here, this is a scenario that can be further investigated being not our purpose here.

In this paper, instead of starting from a specific microscopic model for the interaction between the LCs grains we will propose that the five terms composing the elastic deformations given in eq. (1) can be divided in two geometrical categories, those that can be expressed as a Gaussian curvature of the three-dimensional surface composing the nematic sample, and those that cannot be expressed as this curvature (now on, the Gaussian curvature will be simply named as curvature). At the LCs literature, the director elastic deformations have been freely associated to the director curvature [44–48] and this cannot be straightforwardly done, elastic deformation is a broad concept that does not need to coincide with the very accurate mathematical concept of curvature [36, 49, 50]. In fact, as we will show in detail below, it is possible to conceive elastic deformed surfaces (see figs. 1 and 2) having a null curvature. Conversely, for all surfaces for which we can attribute a curvature we must attribute an elastic deformation.

It is important to emphasize that we will be talking about a three-dimensional NLC sample and, consequently, the surface whose curvature will be calculated is also three dimensional; thanks to Gauss's Theorema Egregium [49, 50] it is possible to consider the curvature of a three-dimensional surface without considering the higher-dimensional space in which it might be contained. With this approach we will give a geometrical and physical interpretation to the elastic deformations that characterizes the free energy density. That is, we will divide F_e in two portions, one corresponding to the director elastic deformations that can be expressed as a curvature R , and those, now on named as G , that are not contained at R . That is, we will assume that the free energy given in eq. (1) can be written as

$$F_e = \alpha R + G. \quad (2)$$

The aim of this work is to determine those director elastic deformations that can be expressed as a scalar curvature R , in a configuration without topological defects (a continuous director field), in such a way that the contribution of R to the above equation can be determined. Of course, it can be asked, what is the importance of the

curvature R for the LCs physics? The answer is simple and straightforward. R is a scalar under transformation of coordinates [36, 49–51]; it assumes the same value in all coordinate systems. Furthermore, as we will see, it describes elastic deformations and, therefore, it must be a part of the F_e . When the expression obtained with eq. (2) is compared with eq. (1) we will find out that, at the bulk, the values of some elastic constants are geometrically connected by the curvature. Of course, R is not the unique scalar characterizing a nematic material and the form of G in eq. (2) can be determined from them.

2 Fundamentals

In this section we will introduce the mathematical tools that will be used to determine the curvature R of the director elastic deformations, the differential geometry fundamentals leading to the concept of the curvature will not be developed here, they can be found on the vast literature about the subject [36, 49–51]. These formulas are shown below and their application will be straightforward. So, once obtained the metric g_{ij} and its inverse g^{kl} , the connection Γ_{jk}^i will be given by [36, 51]

$$\Gamma_{jk}^i = \frac{1}{2} g^{im} \left(\frac{\partial g_{mk}}{\partial x^j} + \frac{\partial g_{mj}}{\partial x^k} - \frac{\partial g_{jk}}{\partial x^m} \right). \quad (3)$$

In this paper, Einstein's sum convention will be adopted. Once we have Γ_{jk}^i , the curvature tensor R_{ijkl}^i is given by

$$R_{ijk}^n = \frac{\partial \Gamma_{ij}^n}{\partial x^k} - \frac{\partial \Gamma_{ik}^n}{\partial x^j} + \Gamma_{ij}^m \Gamma_{mk}^n - \Gamma_{ik}^m \Gamma_{mj}^n, \quad (4)$$

which allow us to compute the Ricci tensor R_{ij} ,

$$R_{ij} = R_{ilj}^l, \quad (5)$$

and the scalar curvature,

$$R = g^{ij} R_{ij}. \quad (6)$$

The obtainment of R and its comparison with eq. (1) is one of the aims of this paper. Reading backwardly eq. (6) to eq. (3) we see that the unique requirement to obtain R is to have a metric g_{ij} , the obtainment of this metric is the aim of the next section.

2.1 The metric

The essentially physical requirement of a metric describing a nematic material is that it must describe the uniaxial anisotropy of the physical measurements. To establish such a metric we will use, as usual, the change of coordinates procedure [36, 51]. Nevertheless, as we will show below this change of coordinates must be non-unitary and, as non-unitary transformations do not preserve lengths, we must elucidate its physical meaning under the context of NLCs.

The approach that we will use here starts in 1986 [40] when Baalss and Hess proposed that the anisotropic properties of a nematic liquid could be obtained from those of

an isotropic liquid once we can deform the equipotential lines of the molecules of the isotropic liquid until they assume the form of the equipotential lines of the nematic molecules; Baalss and Hess call such approach “Affine Connection”. It has the form of a linear transformation acting on the mathematical expression of the isotropic properties from which we can obtain the corresponding anisotropic formula for the nematic case [40,52–55]. Essentially, the non-unitary transformation of Baalss and Hess expresses the passage from an isotropic system to a non-isotropic one.

Nevertheless, in the form proposed by Baalss and Hess their model presents an inconvenience, it only works if the nematic sample is homogeneously aligned along the entire sample. In order to overcome this problem, we had proposed [56] that the Affine Connection approach could be also understood as a change of metric acting non-homogeneously at each point on the sample. That is, we demonstrated that the deformation of the equipotential lines can be attained locally by the introduction of a local anisotropic metric and, as consequence, the Affine Connection would correspond to the linear transformation that, acting locally, leads to this metric [56–65]. Therefore, all the process would be equivalent to a non-unitary change of coordinates. But we have to have in mind that the distance that is not preserved is not the real distance that can be measured with a ruler, but the distance from the surface of the molecular equipotential lines to their center, locally, for each molecule. Interesting enough, when we put all these mathematical tools together the net result is that it all happens as we have made a non-unitary change of coordinates that deforms the system: this is the Baalss and Hess principle [40,52–65].

So, using these ideas, consider a reference system fixed at the laboratory and connects it to a point-dependent reference system whose orientation is such that one of its axes always points to the local anisotropic direction. So, let us consider a non-aligned uniaxial NLC sample whose vectors are simultaneously described in terms of two different orthonormal bases $E^l = \{\vec{l}_1, \vec{l}_2, \vec{l}_3\}$ and $E^p = \{\vec{e}_1, \vec{e}_2, \vec{e}_3\}$. The first, E^l , corresponds to a non-position-dependent basis of a coordinate system fixed in the laboratory, and E^p corresponds to a position-dependent basis of a coordinate system attached to each point of the sample, satisfying the condition that one of the versors, \vec{e}_1 for example, always coincides with the director at that point, $\vec{e}_1 \equiv \vec{n}$. So, the position dependence of E^p contains the system anisotropy and the metric constructed throughout this transformation of coordinates will reflect this anisotropy. As we have said in the last section, once we have obtained a metric we can deduce a curvature R , which is a scalar under transformation of coordinates [36,51]; it assumes the same value in all coordinate systems being, therefore, a relevant parameter to be investigated in LCs physics.

Let us take an arbitrary vector \vec{A} and consider the change of coordinates A_j^i between these two bases

$$A^i = A_j^i \hat{A}^j, \quad (7)$$

where \hat{A}^j are the components of \vec{A} in the basis E^l and A^i are the components of \vec{A} in the basis E^p . Of course, A_j^i has an inverse \hat{A}_i^j :

$$A_k^i \hat{A}_j^k = \delta_j^i. \quad (8)$$

To further improve our knowledge let us express A_j^i and \hat{A}_i^j in terms of the infinitesimal change of position dr^i and $d\hat{r}^j$,

$$dr^i = \frac{\partial r^i}{\partial \hat{r}^j} d\hat{r}^j, \quad (9)$$

as $d\hat{r}^i$ is a vector component; we can compare this expression with eq. (7) obtaining

$$A_j^i = \frac{\partial r^i}{\partial \hat{r}^j}, \quad \hat{A}_j^i = \frac{\partial \hat{r}^i}{\partial r^j}. \quad (10)$$

As at each point we can choose three linear independent vectors, we will assume that the nematic sample is locally uniaxial having at each point a local orthonormal coordinate system $\{\vec{n}, \vec{m}, \vec{p}\}$ such that \vec{n} points always to the anisotropic direction. As $\{\vec{n}, \vec{m}, \vec{p}\}$ are orthonormal we have that

$$\delta_j^i = n^i n_j + m^i m_j + p^i p_j, \quad (11)$$

and, at E^l , we would also have

$$\delta_{ij} = n_i n_j + m_i m_j + p_i p_j. \quad (12)$$

Furthermore, we will assume that the uniaxial anisotropy of the system can be expressed throughout the properties of the eigenvalues and eigenvectors of A_j^i ,

$$\begin{aligned} A_j^i n^j &= \lambda^n n^i, \\ A_j^i m^j &= \lambda^\perp m^i, \\ A_j^i p^j &= \lambda^\perp p^i. \end{aligned} \quad (13)$$

That is, A_j^i has only two independent eigenvalues, λ^n and λ^\perp . The direction \vec{n} is fixed by the anisotropy of the experimental data, but there are two other directions, \vec{m} and \vec{p} , that are perpendicular to \vec{n} but, otherwise, indistinguishable. We will show now how we can express our formulas only in terms of \vec{n} .

With a substitution in eq. (13) we see that A_j^i can be written in terms of $\{\vec{n}, \vec{m}, \vec{p}\}$ as

$$A_j^i = \lambda^n n^i n_j + \lambda^\perp (m^i m_j + p^i p_j).$$

Using eq. (11) we have that A_j^i can be written as

$$A_j^i = \lambda^\perp \delta_j^i + (\lambda^n - \lambda^\perp) n^i n_j. \quad (14)$$

With this result we have been able to write A_j^i in terms of \vec{n} , the local direction of the anisotropy. To proceed, we present the inverse of \hat{A}_i^j :

$$\hat{A}_i^j = \frac{1}{\lambda^\perp} \delta_j^i + \left(\frac{1}{\lambda^n} - \frac{1}{\lambda^\perp} \right) n^i n_j, \quad (15)$$

which can be easily obtained.

In a flat surface the infinitesimal distance ds^2 between two points is given by

$$ds^2 = dr^i dr^j. \quad (16)$$

As in a plane surface there is no difference between covariant and contravariant vectors, we write this relation as

$$ds^2 = \delta_{ij} dr^i dr^j \quad (17)$$

where δ_{ij} is the usual delta function. From this relation it follows that in each coordinate system fixed at each point of the sample we will have that

$$ds^2 = \delta_{ij} \frac{\partial r^i}{\partial r^k} \frac{\partial r^j}{\partial r^l} dr^k dr^l, \quad (18)$$

which means that the corresponding metric would be given by

$$g_{ij} = \delta_{ab} \frac{\partial r^a}{\partial r^i} \frac{\partial r^b}{\partial r^j}. \quad (19)$$

To further improve our expression of g_{ij} we use eq. (19) and eq. (15) to obtain

$$g_{ij} = \left(\frac{1}{\lambda^\perp} \right)^2 \delta_{ij} + \left(\left(\frac{1}{\lambda^u} \right)^2 - \left(\frac{1}{\lambda^\perp} \right)^2 \right) n_i n_j. \quad (20)$$

Furthermore, when it is imposed that

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

and

$$g_{ij} n^i n^j = 1 \quad (22)$$

we will get

$$\begin{aligned} g_{ij} &= a \delta_{ij} + (1-a) n_i n_j, \\ g^{ij} &= \frac{1}{a} \delta^{ij} - \frac{(1-a)}{a} n^i n^j, \end{aligned} \quad (23)$$

where

$$a = \left(\frac{1}{\lambda^\perp} \right)^2. \quad (24)$$

We have deduced the metric that characterizes our system looking for the change of coordinates that transforms an isotropic system into a system with uniaxial anisotropy at each point of the sample. The final result is surprisingly simple: the metric g_{ij} depends on a parameter a and the direction \vec{n} . If $a = 1$ the metric becomes $g_{ij} = \delta_{ij}$ which corresponds to an isotropic medium. Otherwise, when $a \neq 1$ the metric describes an uniaxial anisotropic system characterized by the direction \vec{n} . Consequently, a quantifies the uniaxial anisotropy and \vec{n} gives its direction. It must be also observed that the system is invariant by the change $\vec{n} \longleftrightarrow -\vec{n}$, an essential symmetry of the LCs world.

3 The scalar curvature

With the metric tensor given by eq. (23), we can compute the scalar curvature R . As we have said above, although the calculation implied in these formulas is straightforward, it requires very long manipulations. We will present here the final expression for R . We have created a web address to show all details of the calculations leading to R_{ijkl} , R_{ij} and R . The interested reader can find them at [66].

It is important to emphasize that to obtain the formulas that we present below we have assumed a system without topological defects (constant a and continuous \vec{n}). As we will comment in the conclusion the essence of our results does not depend on these hypotheses. The scalar curvature resulting from these calculations is given by

$$\begin{aligned} R &= -\frac{(1-a)}{a} \partial_i [n^i \partial_j (n^j) + n^j \partial_j (n^i)] \\ &+ \frac{(1-a)^2}{2a^2} g_{jk} \partial^i (n^j) \partial_i (n^k) \\ &- \frac{(1-a)^2}{2a^2} \partial_i (n^j) \partial_j (n^i) \\ &- \frac{(1-a)^2}{2a^2} n^i n^j g_{kl} \partial_i (n^k) \partial_j (n^l), \end{aligned} \quad (25)$$

which is equivalent to

$$R = \frac{(-1+a)^2}{2} a^2 T_1 + \frac{(-1+a)}{a} T_2 - (-1+a) a^2 T_3, \quad (26)$$

where

$$\begin{aligned} T_1 &= (\vec{n} \cdot \vec{\nabla} \times \vec{n})^2, \\ T_2 &= \nabla \cdot (\vec{n} (\vec{\nabla} \cdot \vec{n})), \\ T_3 &= \nabla \cdot (\vec{n} \times \vec{\nabla} \times \vec{n}). \end{aligned} \quad (27)$$

We have used the equalities [67]

$$\begin{aligned} (\vec{\nabla} \cdot \vec{n}) &= \partial_i (n^i), \\ (\vec{\nabla} \times \vec{n})^i &\equiv \frac{1}{a} e^{ijk} \partial_j (n_k), \\ (\vec{n} \times \vec{\nabla} \times \vec{n})^i &= -\frac{1}{a^3} n^j \partial_j (n^i). \end{aligned} \quad (28)$$

The scalar curvature R contains three terms, T_1 , T_2 and T_3 . T_1 is formally identical to the twist term of the Frank free energy and T_2 and T_3 are formally identical to the splay-bend and saddle-splay elastic terms of the Frank free energy, respectively. Together they reveal that, as long as the system has no topological defects, only these elastic terms contribute to the scalar curvature of the sample; there is no contribution to R coming from the splay and bend terms.

At this point it can be asked if the absence of the elastic configurations fixed by K_{11} and K_{33} on R is not a consequence of our hypotheses of absence of topological defects because, for example, at the vertex of the splay term

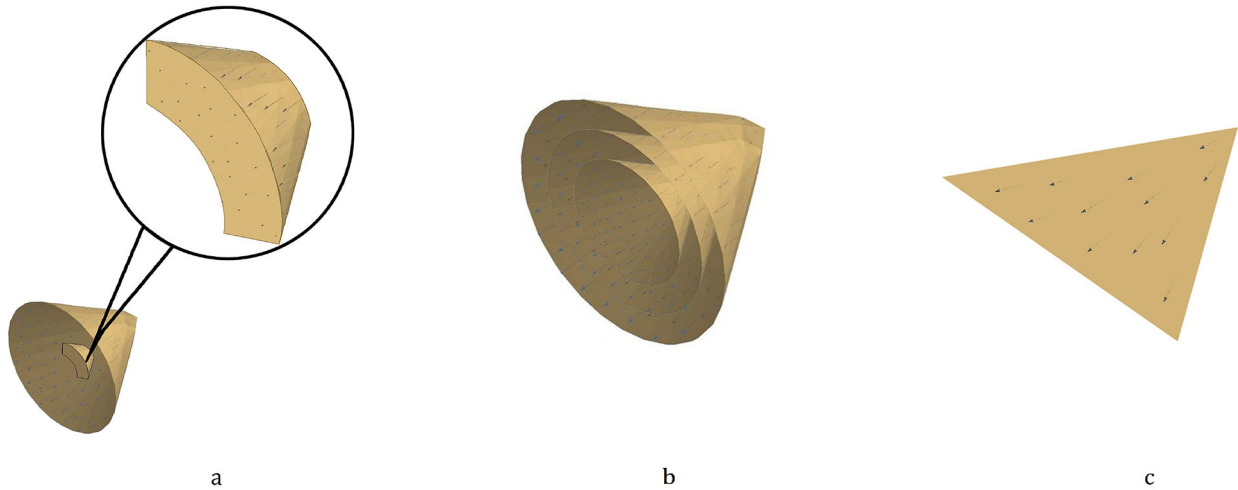


Fig. 1. A geometrical example in which $R = 0$ and $F_e \neq 0$. The sequence of frames shown demonstrates that the splay director configuration of a NLC ($(\vec{\nabla} \cdot \vec{n})^2 \neq 0$ (see fig. 3.1 of [1], or [2] on p. 80) is a developable surface [49, 50] having, therefore, a null Gaussian curvature R . In (a) we show that this nematic director configuration can be regarded as the cut a three-dimensional cone, which has a null curvature, $R = 0$. A straightforward geometrical way to see this result is to realize that the three-dimensional cone can be considered as a superposition of conic sheets, (b), and each of these conic sheets can be unwrapped in a planar cone having $R = 0$. The grounds of differential geometry [49, 50] assure that this sequence of operations characterizes a developable surface, it does not change the nullity of each of its members curvature: if the final sheet of the sequence of operations has null curvature, the initial one also has. Consequently, save for the singular point at the cone vertex, the director configurations contributing to the splay term of the F_e do not contribute to the curvature.

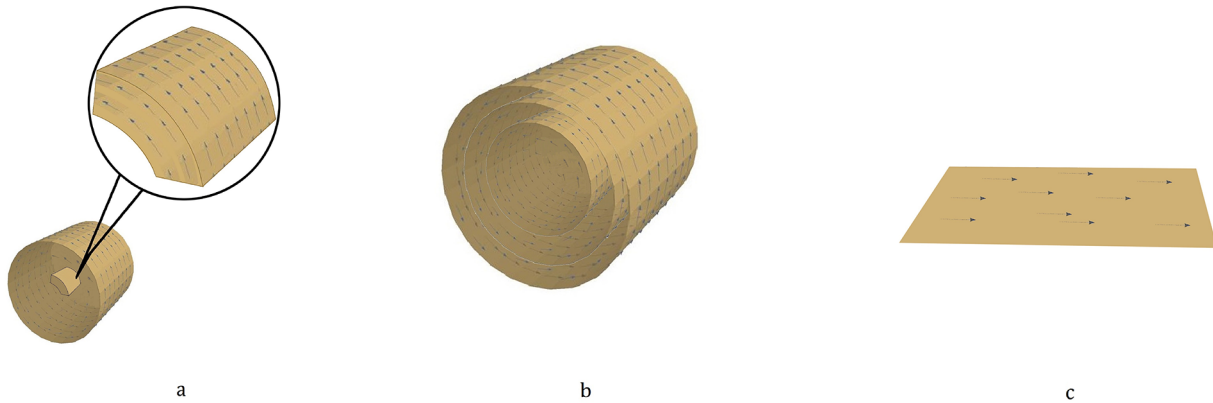


Fig. 2. Another example of $R = 0$ and $F_e \neq 0$. Similarly to what we have done for fig. 1 this sequence of frames shows that the bend director configuration of a NLC is a developable surface [49, 50]. We show in the balloon of panel (a) that the usual director nematic configuration corresponding to the bend term $(\vec{n} \times (\vec{\nabla} \times \vec{n}))^2 \neq 0$ (see fig. 3.1 of [1], or [2] on p. 80) can be considered as a piece of a three-dimensional cylinder. This cylinder can be described as a superposition of two-dimensional cylindrical sheets, which can be unwrapped in planar sheets having null curvature. Therefore, as above, the F_e bend term has null curvature, $R = 0$.

$(\vec{\nabla} \cdot \vec{n})^2$ we have, necessarily, a topological defect. We will give below two arguments to show that the answer is negative. Firstly, to understand why only the terms T_1 , T_2 and T_3 of the Frank Free energy F_e appear at the scalar curvature, we remember that generally not all distorted surfaces have a non-null scalar curvature. We will give here a geometrical argument showing how this result appears in the context of the NLCs. The essence of the argument is to show that the three-dimensional director configurations corresponding to K_{11} and K_{33} coincide with two of the classical examples of developable surfaces [49, 50]

having null curvature. A developable surface is a surface that can be sliced and unfolded without any stretching or compressing, until the final configuration becomes a plane surface.

Consider fig. 1, in the balloon of fig. 1(a) we recognize the usual nematic director configuration leading to the splay configuration $(\vec{\nabla} \cdot \vec{n})^2 \neq 0$ (see [1] p. 99, or [2] p. 80). The inferior part of fig. 1(a) shows that the figure in the balloon is indeed a portion of a three-dimensional cone. In fig. 1(b) we see that the three-dimensional cone of fig. 1(a) can be sliced and taken as the sum of two-

dimensional conic sheets. Furthermore, each of these conic sheets can be further opened as in fig. 1(c). The final result is a planar cone whose curvature is null, $R = 0$. The grounds of differential geometry [49, 50] teach us that the operations leading from fig. 1(a) to fig. 1(c) do not modify the null curvature of these three figures. That is, if fig. 1(c) has a null curvature, then fig. 1(a) also has. As this configuration constitutes the classical example of a splay term, we have here an example of a configuration for which $F_e \neq 0$ and $R = 0$.

Exactly the same can be done for the nematic configuration shown in fig. 2. In fig. 2(a) we see the classical example for which the bend term $((\vec{n} \times (\vec{\nabla} \times \vec{n}))^2 \neq 0)$ is non-null. Exactly the same procedures that we have done above, cutting and unwrapping the splay nematic configuration, can be done in this case. The final configuration is a planar configuration for which $R = 0$. Therefore, it is also a developable surface and, therefore, the bend free energy elastic deformations also has $R = 0$.

The second argument is given by the explicit expression of R with $\partial_r a \neq 0$. We have done these calculations and the result is given by

$$\begin{aligned}
 R = & \frac{(1-a)^2}{2} a^2 \left(\vec{n} \cdot (\vec{\nabla} \times \vec{n}) \right)^2 + \frac{(1-a)}{a} \vec{\nabla} \cdot \left(\vec{n} (\vec{\nabla} \cdot \vec{n}) \right) \\
 & - (1-a) a^2 \vec{\nabla} \cdot \left(\vec{n} \times (\vec{\nabla} \times \vec{n}) \right) \\
 & + \frac{1}{a} (\nabla^2 a) + \frac{1}{a^2} \vec{\nabla} \cdot \left(\vec{n} (\vec{n} \cdot (\vec{\nabla} a)) \right) \\
 & - \left(\vec{n} \times (\vec{\nabla} a) \right)^2 - \frac{3a+4}{2a^3} \left(\vec{n} \cdot (\vec{\nabla} a) \right)^2 \\
 & + \frac{1}{a^2} \left(\vec{n} \cdot (\vec{\nabla} a) \right) (\vec{\nabla} \cdot \vec{n}) \\
 & + a(1-2a) (\vec{\nabla} a) \left(\vec{n} \times (\vec{\nabla} \times \vec{n}) \right). \quad (29)
 \end{aligned}$$

This expression is replete of terms that must be further interpreted, we will not do it here, our intention is only to show that the elastic deformations corresponding to K_{11} and K_{33} remain absent in the curvature R and the bulk form of K_{22} , K_{13} and K_{24} remains the same. This is the reason why a constant a can be assumed without modifying the essence of our results.

Otherwise, it is important to realize that always when we have $R \neq 0$ we must have necessarily $F_e \neq 0$. This is immediately obvious from the form of R given in eq. (26). If we have $R \neq 0$ we must necessarily have $T_1 \neq 0$ or $T_2 \neq 0$ or $T_3 \neq 0$. For any of these cases we must have $F_e \neq 0$. Consequently, a liquid crystal sample presenting a non-null R will, necessarily, present a non-null F_e .

Furthermore, in eq. (26) the amount of contribution of the terms T_1 , T_2 and T_3 to the curvature is explicitly expressed in terms of the anisotropic term a . Consequently, contrarily to what happens with the free energy of the NLC, where the constants K_{22} , K_{13} and K_{24} must have posterior determination, in eq. (26) the relative contribution of each of these terms to the curvature was effectively given. Consequently, we have demonstrated the validity of eq. (2) and, furthermore, we have found a measurement of the relative contribution of the twist, splay-bend and

saddle-splay elastic terms to the free energy. Namely,

$$\begin{aligned}
 K_{22} &= \alpha (a-1)^2 a^2, \\
 K_{13} &= \alpha \frac{(a-1)(1+a^3)}{a}, \\
 K_{24} &= \alpha (a-1)(2-a) a^2, \quad (30)
 \end{aligned}$$

where α is the arbitrary constant defined in eq. (2). Consequently,

$$\begin{aligned}
 \frac{K_{13}}{K_{22}} &= \frac{(1+a^3)}{(a-1)a^3}, \\
 \frac{K_{24}}{K_{22}} &= \frac{(2-a)}{(a-1)}, \\
 \frac{K_{24}}{K_{13}} &= \frac{(2-a)a^3}{(1+a^3)}. \quad (31)
 \end{aligned}$$

As the determination of K_{22} is a straightforward exercise, the determination of K_{13} and K_{24} can be done with the above formulas. Observe that there is an important conceptual difference between these expressions for the curvature and the corresponding expression for the elastic energy. In the case of the free energy the splay-bend and the saddle-splay contribution to the free energy density can be integrated, effectively removed from the bulk, and considered as a surface effect. Here, as long as the curvature is a geometric local effect, these terms cannot be removed and considered as a surface effect. They have an effective geometrical local effect, they contribute to the local curvature of the system. This is the meaning of the above relations. The values found for K_{13} and K_{24} are not those that could, at least in hypotheses, be measured at the surface anchoring the system; we have not considered surface effects. We have here the contribution of these two elastic deformations to the local curvature of the system. Even when we consider the elastic energy as a functional [12] this distinction is not removed.

4 Final remarks and conclusion

Let us synthesize here the achievements of our paper. We have shown that both the free energy F_e and the scalar curvature R are scalars formed with combinations of n^i and dn^j/dx^i . They measure the elastic deformations and each one must remain the same for all observers being, therefore, invariants by coordinate transformations. Nevertheless, they give different values for elastic deformations. The curvature is restricted to the evaluation of those elastic deformations that can be computed with measurements made inside the n -dimensional surface in which the sample is contained; to define curvature it is not necessary to introduce an extra dimension in which the sample is "curved", this is Gauss's Theorema Egregium [49, 50]. Otherwise, F_e is not a geometrical concept like the curvature, it considers all possible director deformations, up the second order in n^i and dn^j/dx^i , which are compatible with the symmetries of the system. Therefore, F_e contains

the curvature, but it is not contained by it. This is the reason why we can divide the elastic free energy in two parts, those having curvature and those not having it, eq. (2) of our paper. So, once a term appears in R it is completely determined and must be also present in F_e .

A question also considered in our paper is the relation between these two concepts. Firstly, they differ in their range, the scalar curvature is a local concept, defined at the neighborhoods of each point of the sample, eq. (6) of our paper. F_e is a global concept; it involves integration over the volume of the system. Furthermore, even when we consider the density of the free energy, defined in eq. (1) of our paper, which is a local concept, there are some kinds of elastic deformations that are not accounted by the curvature of the nematic sample; these are the splay and bend elastic deformations. Consequently, as long as we consider LCs, the density of the free energy is a more general concept than the curvature. To make these ideas clear, we have described those elastic deformations common to the F_e and R : they are the elastic terms of twist, splay-bend and the saddle-splay.

Finally, note that we only computed the bulk contributions to K_{13} and K_{24} . It is important to stress that because the curvature is a local concept and, consequently, the splay-bend and saddle-splay terms give bulk contributions to the curvature. But, otherwise, as the F_e is a global concept (it involves integration over the volume) the bulk contributions of these two terms to the F_e are “swept” to the border of the sample where the interaction between the LC matter and the container must be also taken into account.

We are thankful to the Brazilian Agencies CAPES, Fundação Araucária (PR) and CNPq (MCT) for the financial support.

Author contribution statement

MS was the supervisor of the work, he conceived the problem, directed all the calculations and wrote the final version of the paper. WB worked at computational and analytic calculations and in the interpretation of the results. TD worked at computational and analytic calculations in the interpretation of the results and made the graphics of the paper.

Publisher’s Note The EPJ Publishers remain neutral with regard to jurisdictional claims in published maps and institutional affiliations.

References

- P.G. de Gennes, J. Prost, *The Physics of Liquid Crystals*, 2nd edition (Clarendon Press, Oxford, 1993).
- D.A. Dunmur, *Liquid Crystals: Fundamentals* (World Scientific Publishing Co, 2002).
- C. Oldano, G. Barbero, J. Phys. (Paris) Lett. **46**, 451 (1985).
- C. Oldano, G. Barbero, Phys. Lett. A **110**, 213 (1985).
- C. Oldano, G. Barbero, J. Phys. (Paris) Lett. **46**, L-451 (1985).
- C. Oldano, G. Barbero, Nuovo Cimento D **6**, 479 (1985).
- H.P. Hinov, Mol. Cryst. Liq. Cryst. **148**, 197 (1987).
- G. Barbero, A. Strigazzi, Liq. Cryst. **5**, 693 (1989).
- C. Oldano, G. Barbero, Mol. Cryst. Liq. Cryst. **170**, 99 (1989).
- G. Barbero, A. Sparavigna, A. Strigazzi, Nuovo Cimento D **12**, 1259 (1990).
- H.P. Hinov, Mol. Cryst. Liq. Cryst. **178**, 53 (1990).
- V.M. Pergamenschchik, Phys. Rev. E **48**, 1256 (1993).
- S. Faetti, Phys. Rev. E **49**, 4192 (1994).
- S. Stallinga, G. Vertogen, Phys. Rev. E **53**, 1692 (1996).
- S. Faetti, Phys. Lett. A **255**, 165 (1999).
- G. Barbero, L.R. Evangelista, *An Elementary Course on the Continuum Theory for Nematic Liquid Crystals* (World Scientific, 2001).
- F.C. Frank, Discuss. Faraday Soc. **25**, 19 (1958).
- C.W. Oseen, Trans. Faraday Soc. **29**, 883 (1993).
- H. Zocher, Trans. Faraday Soc. **29**, 945 (1993).
- J. Nehring, A. Saupe, J. Chem. Phys. **56**, 5527 (1972).
- M. Faetti, S. Faetti, Phys. Rev. E **57**, 6741 (1998).
- G.P. Chen, H. Takezoe, A. Fukuda, Liq. Cryst. **5**, 341 (1989).
- W.H. de Jeu, W.A.P. Claassen, M.J. Spruijt, Mol. Cryst. Liq. Cryst. **37**, 269 (1976).
- N.V. Madhusudana, P.P. Karat, S. Chandrasekhar, Pramana Suppl. **1**, 225 (1975).
- H. Gruler, T.J. Sheffer, G. Meier, Z. Naturforsch. **27a**, 966 (1972).
- S. Scharkowski, H. Schmiedel, R. Sranarius, E. Weishuhn, Z. Naturforsch. **45a**, 942 (1990).
- M.P. Allen, D. Frenkel, Phys. Rev. A **37**, R1813 (1988).
- M.A. Osipov, S. Hess, Liq. Cryst. **16**, 845 (1994).
- J. Nehring, A. Saupe, J. Chem. Phys. **54**, 337 (1971).
- J. Nehring, A. Saupe, J. Chem. Phys. **56**, 5527 (1972).
- G. Vertogen, S.D. Flapper, C. Dullemond, J. Chem. Phys. **76**, 616 (1982).
- G. Vertogen, Phys. Lett. A **89**, 448 (1983).
- G. Vertogen, Physica A **117**, 227 (1983).
- M.A. Osipov, S. Hess, Mol. Phys. **78**, 1191 (1993).
- M.A. Osipov, S. Hess, Chem. Phys. **99**, 4181 (1993).
- S. Weinberg, *Gravitation and Cosmology* (John Wiley & Sons, New York, 1972).
- G. Napoli, L. Vergori, Phys. Rev. Lett. **108**, 207803 (2012).
- C. Mostajeran, Phys. Rev. E **91**, 062405 (2015).
- C. Satiro, F. Moraes, Eur. Phys. J. E **20**, 173 (2006).
- D. Baalss, S. Hess, Phys. Rev. Lett. **57**, 86 (1986).
- M. Simões, M. Pazetti, EPL **92**, 14001 (2010).
- F. Serra, Liq. Cryst. **43**, 1920 (2016).
- D. Jesenek, S. Kralj, R. Rosso, E.G. Virga, Soft Matter **11**, 2434 (2015).
- M.J. Stephen, J.P. Straley, Rev. Mod. Phys. **46**, 617 (1974).
- L.R. Evangelista, I. Hibler, H. Mukai, Phys. Rev. E **58**, 3245 (1998).
- G. Barbero, R. Barberi, in *Physics of Liquid Crystalline Materials*, edited by I.C. Khoo, F. Simoni (Gordon and Breach, New York, 1993).
- G. Barbero, L.R. Evangelista, Phys. Rev. E **56**, 6189 (1997).
- G. Barbero, L.R. Evangelista, M. Giocondo, S. Ponti, J. Phys. II **4**, 1519 (1994).

49. David Hilbert, Stephan Cohn-Vossen, *Geometry and the Imagination*, 2nd edition (Chelsea, New York, 1952) ISBN 978-0-8284-1087-8.
50. B.F. Schutz, *Geometrical Methods of Mathematical Physics* (Cambridge University Press, 1980).
51. L.D. Landau, E.M. Lifshitz, *Statistical Physics* (Pergamon, London, 1959).
52. D. Baalss, S. Hess, Z. Naturforsch. A: Phys. Sci. **43**, 662 (1988).
53. H. Sollich, D. Baalss, S. Hess, Mol. Cryst. Liq. Cryst. **168**, 189 (1989).
54. S. Hess, J.F. Schwarzl, D.J. Baalss, J. Phys.: Condens. Matter **2**, SA279 (1990) (Supplement).
55. H. Ehrentraut, S. Hess, Phys. Rev. E **51**, 2203 (1995).
56. M. Simões *et al.*, Phys. Rev. E **75**, 061710 (2007).
57. M. Simões *et al.*, Phys. Rev. E **77**, 041709 (2008).
58. M. Simões *et al.*, Mol. Cryst. Liq. Cryst. **576**, 53 (2013).
59. M. Simões *et al.*, J. Chem. Phys. **137**, 204905 (2012).
60. M. Simões *et al.*, Liq. Cryst. **38**, 61 (2011).
61. M. Simões *et al.*, Phys. Rev. **83**, 051702 (2011).
62. M. Simões *et al.*, Physica A **389**, 4000 (2010).
63. M. Simões *et al.*, Europhys. Lett. **92**, 14001 (2010).
64. M. Simões *et al.*, Phys. Rev. E **80**, 061701 (2009).
65. M. Simões *et al.*, Physica A **388**, 3307 (2009).
66. <https://sites.google.com/site/nematiccurvature/curvature.pdf>.
67. J.H. Heinbockel, *Introduction to Tensor Calculus and Continuum Mechanics* (Department of Mathematics and Statistics Old Dominion University, USA).