



UNIVERSIDADE  
ESTADUAL DE LONDRINA

---

DAVID CARLO ALMEIDA BARBATO

**CÁLCULO DA ELASTICIDADE DE CRISTAIS LÍQUIDOS  
NEMÁTICOS ATRAVÉS DE MÉTODOS DA GEOMETRIA  
DIFERENCIAL**

---

Londrina  
2007

**DAVID CARLO ALMEIDA BARBATO**

**CÁLCULO DA ELASTICIDADE DE CRISTAIS LÍQUIDOS  
NEMÁTICOS ATRAVÉS DE MÉTODOS DA GEOMETRIA  
DIFERENCIAL**

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Física da Universidade Estadual de Londrina, como requisito parcial à obtenção do título de Mestre em Física.

Orientador: Prof. Dr. Manuel Simões Filho

Londrina  
2007

**DAVID CARLO ALMEIDA BARBATO**

**CÁLCULO DA ELASTICIDADE DE CRISTAIS LÍQUIDOS  
NEMÁTICOS ATRAVÉS DE MÉTODOS DA GEOMETRIA  
DIFERENCIAL**

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Física da Universidade Estadual de Londrina, como requisito parcial à obtenção do título de Mestre em Física.

**BANCA EXAMINADORA**

---

Prof. Dr. Manuel Simões Filho  
Universidade Estadual de Londrina

---

Prof. Dr. Antônio Edson  
Universidade Estadual de Londrina

---

Prof. Dr. Roberto Kraenkel  
Instituto de Física Teórica  
Universidade Estadual de São Paulo

Londrina, 20 de fevereiro de 2007.

**Dedico à minha mãe e à memória de meu pai.**

## **AGRADECIMENTOS**

Àquele que tudo criou por Amor a nós, seres-humanos.

Às pessoa que colaboraram com a confecção deste trabalho, em especial a Manuel Simões que me orientou neste mestrado; ao Fernando e à Adriana pelas correções, questionamentos e conversas de toda sorte; à Isabel, por ser sempre solícita e alegre em seu trabalho.

Aos amigos (do GOU, da PU, do Javé-Nessi, de Schönstatt) que sempre estiveram por perto dando apoio e muita força (mesmo sem saberem).

"Minha teoria é a de que  
nossos erros são as únicas  
coisas originais que fazemos"

Billy Joel

"Onde há muito amor,  
há sempre milagres"

Thomas Ehrlich

BARBATO, David Carlo Almeida. **Cálculo da elasticidade de cristais líquidos nemáticos através de métodos da geometria diferencial**. 2007. 86f. Dissertação (Mestrado em Física) – Universidades Estadual de Londrina, Londrina, 2007.

## RESUMO

Encontradas na fórmula da energia livre de Frank, as constantes elásticas de volume dos cristais líquidos nemáticos são computadas neste trabalho através de uma generalização do método de transformação afim. Este consiste na deformação das moléculas esféricas de um fluido isotrópico em moléculas elipsoidais. Com o método proposto neste trabalho, leva-se em consideração a distribuição não-homogênea dos diretores, que são definidos pelos potenciais elipsoidais, é realizado o cálculo da métrica que descreve a transformação de coordenadas capaz de tornar efetiva a deformação desejada. Um resultado obtido é a constatação de que o espaço que embebe o fluido isotrópico, tornando-o anisotrópico, tem uma curvatura intrínseca. Isto implica que, ao calcular as grandezas do cristal líquido, deve-se empregar ferramentas matemáticas adequadas para operar nessa espécie de espaço. As relações apropriadas para tal fim pertencem ao arcabouço da geometria diferencial e são empregadas ao longo deste trabalho.

**Palavras-chave:** Geometria diferencial. Cristal líquido nemático. Elasticidade. Constantes elásticas. Conexão afim. Transformação de coordenadas. Métrica.

BARBATO, David Carlo Almeida. **The essence of Reed Richards, the fantastic doctor**: an geometric approach to the nematic elastic constants research. 2007. 86f. Dissertation (Máster Degree in Physics) – Universidade Estadual de Londrina, Londrina, 2007.

## ABSTRACT

Found on Frank free energy relation, the bulk elastic constants of the nematic liquid crystals are computed in this work through an approach based on the affine connection method. This consists in the deformation of the isotropic fluid spherical molecules until they acquire an elipsoidal shape, likely the estimated nematic molecules form. Herewith the method presented in this work, is taken in account the inhomogeneous director arrangement. Here the metric calculation is done. It describes the coordinates transformation that realizes the desired deformation. A result that arises is the inherent curvature of the space comprising isotropic fluid, in which became an anisotropic one. So must be used suitable mathematics tools in this curved space. The appropriated ones belongs to the differential geometric framing, and they will be used in the course of this labour.

**Keywords:** Differential geometry. Nematic liquid crystal. Elasticity. Elastic constants. Affine connection. Coordinate transformation. Metric.

## LISTA DE ILUSTRAÇÕES

- Figura 1** – Mielina; o cristal líquido que guarda os nervos..... 13  
retirada de: [http://www.geocities.com/omegaman\\_UK](http://www.geocities.com/omegaman_UK).
- Figura 2** – Ilustração do alinhamento das moléculas em alguma fases de um cristal líquido..... 14  
retirada de: <http://www.elis.ugent.be/ELISgroup/lcd/lc>
- Figura 3** – Estrutura típica de uma molécula de cristal líquido ..... 15
- Figura 4** – Estrutura química de uma molécula de PAA ..... 15
- Figura 5** – Estrutura química de uma molécula de MBBA ..... 16
- Figura 6** – Estrutura química de uma molécula de MHPOBC..... 16
- Figura 7** – Ilustração da conformação dos diretores nos três tipos de distorções elementares ..... 74  
retirada de: <http://www.elis.ugent.be/ELISgroup/lcd/lc>

## SUMÁRIO

<b>CAPÍTULO 1 – INTRODUÇÃO</b> .....	10
<b>CAPÍTULO 2 – CRISTAIS LÍQUIDOS</b> .....	12
<b>CAPÍTULO 3 – GEOMETRIA DIFERENCIAL</b> .....	21
3.1 INTRODUÇÃO .....	21
3.2 CURVASEM ESPAÇOS CURVOS .....	22
3.3 BASE MÓVEL .....	24
3.4 PLANOS DA BASE MÓVEL.....	25
3.5 ORDEM DE CONTATO .....	26
3.6 CÍRCULO OSCULANTE .....	27
3.7 FÓRMULAS DE FRENET .....	30
3.8 EQUAÇÕES NATURAIS DO ESPAÇO CURVO.....	32
3.9 ESPAÇO BIDIMENSIONAL CURVO .....	34
3.10 ESPAÇO N - DIMENSIONAL CURVO.....	43
3.11 TENSOR CURVATURA .....	51
<b>CAPÍTULO 4 – ALTERANDOAS MEDIDAS</b> .....	61
<b>CAPÍTULO 5 – ELASTICIDADE</b> .....	72
<b>CAPÍTULO 6 – CONCLUSÕES</b> .....	81
<b>REFERÊNCIAS</b> .....	83

## CAPÍTULO 1

### INTRODUÇÃO

A determinação do caráter termodinâmico das constantes elásticas dos cristais líquidos nemáticos [1-3] é um velho problema para cuja solução os métodos experimentais[4-8], numéricos[9,10] e analíticos[11-16] foram empregados. Para cada um desses métodos conjuntos complementares de resultados foram encontrados. Apesar de tantos desenvolvimentos, a compreensão das constantes elásticas não está completa[17]; apenas a dependência dos seus termos principais com o parâmetro de ordem escalar está estabelecida com solidez[18], e até mesmo há algum tempo a natureza do ancoramento ("anchoring") das moléculas do cristal líquido à superfície de contato da amostra com o recipiente foi tema de intensa pesquisa[19-22].

Alguns anos atrás Hess, conjuntamente com outros pesquisadores[23-27], propôs um método para obter as propriedades reológicas anisotrópicas de um cristal líquido. Parte-se de um fluido isotrópico de moléculas esféricas, e, por meio de uma transformação afim, deforma-se os potenciais esféricos dessas moléculas para que eles assumam a forma elipsoidal dos potenciais de interação dos aglomerados moleculares dos cristais líquidos. Uma limitação desse formalismo proposto é que ele não contempla o caráter não-homogêneo da distribuição dos diretores no material, ou seja, em cada posição dentro do cristal líquido nemático os potenciais definem uma direção diferente.

Devido à dependência com a posição dos diretores, as ferramentas matemáticas empregadas nesse método devem levar em conta essa dependência. A principal meta deste trabalho é a sugerir de um método geométrico que considera a dependência posicional do diretor. Com ele espera-se obter um método mais geral que o apresentado por Hess, e que produza resultados mais fidedignos.

Ferramentas da geometria diferencial concomitantemente com uma abordagem pseudo-molecular[28-31] são utilizados para obter o valor das

constantes elásticas. A aplicação desse estratagema mapeia a textura nemática numa superfície curva. Isso implica que o cálculo diferencial usual não pode ser empregado, visto que as derivadas comuns não se transformam como vetores. O procedimento adequado é a substituição destas pelas derivadas covariantes[32], construídas para operar sob essas condições.

As ferramentas matemáticas que descrevem essas mudanças das propriedades do espaço são conhecidas usuais em vários ramos da física, no entanto, até onde têm-se conhecimento – exceto para os casos onde os defeitos dos cristais líquidos são empregados para simular as características do caminho que a luz percorre nas vizinhanças de singularidades cósmicas[33,34] – tal método não é comumente empregado na física dos cristais líquidos.

Um resultado absolutamente não-trivial pode ser obtido com este método, justificando a introdução desse formalismo aos estudos correntes de cristais líquidos. Trata-se da obtenção do valor das constantes elásticas de cristais líquidos nemáticos a partir de considerações simples: a energia livre deve ser um escalar construído com os objetos matemáticos fundamentais da teoria[35].

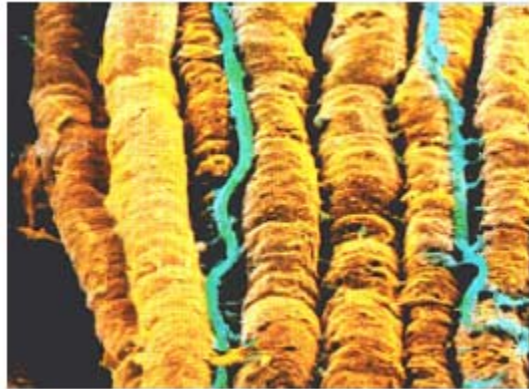
## **CAPÍTULO 2**

### **CRISTAIS LÍQUIDOS[34-36]**

Todo organismo vivo na face da Terra é feito de células. A própria vida é mantida pelas células interagindo umas com as outras – absorvendo nutrientes e devolvendo proteínas. Contudo estas mesmas células, tão delicadas constituem os corpos de até mesmo as maiores e robustas criaturas. Existe um tipo de material perfeitamente adequado para ambos que pode prover a força e a flexibilidade necessárias para uma célula viva: o cristal líquido!

Cristal líquido!?! Cristal ou líquido? Nem cristal, nem líquido; cristal-líquido! Pois, embora as substâncias que recebem esse nome apresentem propriedades de líquidos, tais como viscosidade, fluidez, assumam a forma de seu recipiente, não suportam cisalhamento, elas não podem ser colocadas na mesma categoria dos líquidos. Esses compostos orgânicos exibem uma característica própria de sólidos cristalinos: a anisotropia das propriedades físicas. Isto é, a maneira e/ou intensidade com que tais substâncias interagem com campos magnéticos, elétricos e a luz varia com a direção de propagação desses campos. É essa combinação incomum de propriedades macroscópicas que os tornaram tão fascinante para os pesquisadores que os estudaram e tão importantes para as aplicações em que são empregados hoje em dia: mostradores de relógio, celulares e monitores de vídeo. E isto é só o começo de sua aplicação, muito mais está a caminho, desde uma compreensão maior dos mecanismos de proliferação do câncer até simulações do princípio do universo, passando por células fotovoltaicas, fibras óticas e polímeros com propriedades inimagináveis[34].

Os cristais líquidos estão continuamente revelando surpresas aos cientistas até hoje, mais de um século após sua descoberta. Os primeiros a avistá-lo foram cientistas que estudavam, por volta de 1850, um material branco e gorduroso, a mielina, que recobre as fibras nervosas do corpo humano da mesma forma que o plástico isola os cabos elétricos:

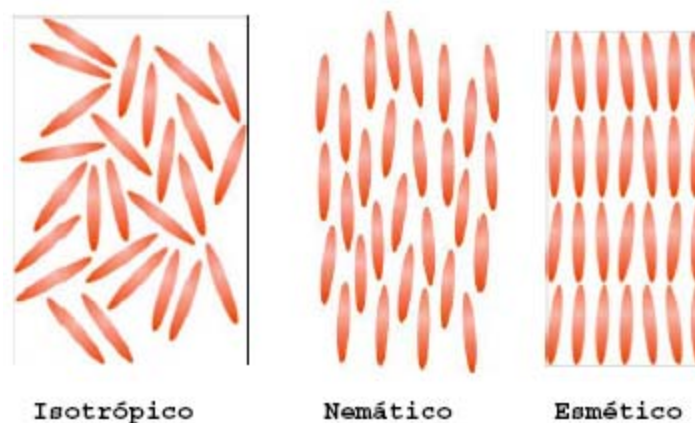


**Figura 1** – Mielina; o cristal líquido que guarda os nervos.

Esses cientistas notaram que a mielina torna-se líquida quando colocada na água. Este líquido era distinto dos outros, e sob certas condições de iluminação produzia cores espetaculares. Apesar disso e de outras propriedades estranhas, eles não consideraram que se tratava de uma novo estado da matéria. Foi apenas em 1888 que Reinitzer relatou sistematicamente as propriedades do benzoato de colesterol que se considerou como descoberta uma nova fase.

A fonte de tantas peculiaridades reside na sua anisotropia, de origem microscópica. Embora as moléculas que constituem os fluidos ordinários tenham em geral formato anisométrico, esta anisometria tem pouca importância no comportamento macroscópico do material. Todavia, existe uma grande quantidade de moléculas altamente anisométricas que dão origem aos comportamentos incomuns, fascinantes e de potencial tecnológico relevantes. Entre eles figuram os cristais líquidos. Eles são compostos por moléculas orgânicas de tamanho moderado que costumam ser alongadas, como um lápis. A mudança de fase pode ser causada pela mudança de temperatura – neste caso a substância é conhecida como cristal líquido termotrópico, ou ainda ela pode ser deflagrada pela variação na concentração de cristal líquido em meio a um solvente – estes são os cristais líquidos liotrópicos. Para os termotrópicos, acima de uma certa temperatura, as moléculas ficam arranjadas aleatoriamente, como num líquido convencional. É esta configuração que torna o líquido isotrópico. Porém, ao ultrapassar o ponto crítico da temperatura, o cristal líquido começa a manifestar

suas propriedades peculiares; suas moléculas se alinham paralelamente umas às outras. Esta ordem orientacional já é suficiente para imprimir ao material certas propriedades do sólido; entretanto as moléculas ainda são livres para circular pelo fluido. Esta fase constitui o chamado cristal líquido nemático. É importante salientar que o nome "cristal líquido" tem duas conotações, uma serve para denotar o estado da matéria, apresentado por alguns compostos, compreendido entre os sólidos e os líquidos, a outra nomeia os compostos que apresentam esta fase. Não apenas ordem orientacional pode surgir, ao se reduzir ainda mais a temperatura, ordem posicional também pode ocorrer. Nesta fase, chamada esmética, os centros de massa das moléculas se dispõem em camadas; cada vez mais propriedades da fase sólida se manifestam, mas ainda resta algum movimento, que fica restrito principalmente ao interior de cada estrato. Ao se abaixar a temperatura além de outro ponto crítico, o movimento dentro do fluido cessa, as moléculas ficam presas em seus lugares, o material torna-se sólido e as propriedades de líquido desaparecem completamente.

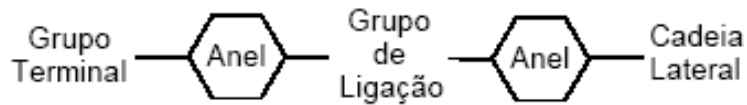


**Figura 2** – Ilustração do alinhamento das moléculas em alguma fases de um cristal líquido

Na fase nemática do cristal líquido as moléculas estão aproximadamente alinhadas paralelamente umas às outras. Em cada  $r$  um vetor unitário pode ser definido, paralelamente à direção média do eixo maior das moléculas na vizinhança adjacente ao ponto. Este vetor, conhecido por diretor e

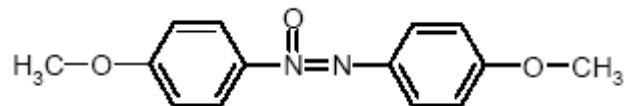
denotado por  $n$ , não é constante ao longo de toda a amostra, mas é uma função do espaço,  $n(r)$ . Outra importante variável no cristal líquido nemático é o parâmetro de ordem, que mede quão alinhadas com o diretor estão as moléculas.

A figura abaixo mostra a estrutura molecular de uma típica molécula de cristal líquido com formato de bastonete. Ela consiste de dois ou mais sistemas de anéis conectados por um grupo de ligação central



**Figura 3** – Estrutura típica de uma molécula de cristal líquido

Os anéis são a fonte das forças moleculares de curto alcance necessárias para formar a fase nemática, mas eles também afetam as propriedades elétricas e elásticas. A estabilidade dos cristais líquidos depende fortemente do grupo de ligação central. Compostos com uma ligação simples no meio estão entre os mais estáveis. De um lado dos anéis existe uma longa cadeia que exerce grande influência sobre as constantes elásticas e na temperatura de transição de fase dos cristais líquidos. Na outra ponta é conectado um grupo terminal, que determina a constante dielétrica e a anisotropia. Alguns exemplos de moléculas que exibem a fase cristal líquido são apresentadas a seguir:



**Figura 4** – PAA



faz surgir interessantes possibilidades tecnológicas. Dois fenômenos incomuns são a reorientação das moléculas num campo elétrico e birrefringência ótica das moléculas[36].

A polarização elipsoidal da luz pode ser decomposta numa superposição de polarizações lineares ao longo de dois eixos perpendiculares. Num meio isotrópico ambas as polarizações lineares se movimentam com a mesma velocidade. Quem determina a rapidez de uma onda é o índice de refração do meio. Num meio constituído por um cristal líquido uniaxial, a luz percebe índices de refração diferentes quando oscila no plano perpendicular ou ao longo do diretor. Esta anisotropia uniaxial do índice de refração é chamada birrefringência. Por isso, uma componente da polarização atravessa mais rapidamente o meio que a outra componente, o que acarreta uma diferença de fase entre os dois modos. Ao emergir do cristal líquido, esta diferença de fase entre as duas componentes resulta numa polarização diferente da inicial. Portanto, a birrefringência permite a manipulação da polarização da luz que se propaga através de um cristal líquido.

No princípio da década de 30 alguns cientistas tentaram aplicar essa propriedade numa nova forma de mostrador de dados, onde suas propriedades óticas – e portanto o que aparece no display – seriam controladas por mudanças de temperatura. Porém os cristais líquidos conhecidos naquela época eram instáveis para pequenas variações de temperatura, e seu comportamento era muito irregular para usos práticos[34].

A reviravolta veio apenas 40 anos mais tarde, nos laboratórios de química da Universidade de Hull. George Gray e seus colegas obtiveram sucesso em sintetizar o primeiro cristal líquido realmente estável. Mais conhecido como alquilcianobifenil nemático, ele era barato assim como estável – e suas propriedades óticas podiam ser controladas com precisão através do uso de pequenas cargas elétricas ao invés do calor. Devido à anisotropia uniaxial, um campo elétrico experimenta constantes dielétricas diferentes ao oscilar na direção paralela ou perpendicular ao diretor.

Esta diferença é nomeada anisotropia dielétrica. Se a constante dielétrica na direção definida pelo diretor é maior que na direção perpendicular, a anisotropia é positiva. Por causa também da anisotropia, o vetor deslocamento elétrico e o momento de dipolo induzido não são paralelos ao campo elétrico, a não ser quando o diretor é paralelo ou perpendicular ao campo elétrico. Como consequência, o diretor sofre a aplicação de um torque. Para materiais com anisotropia positiva, o diretor tende a se alinhar paralelamente ao campo. Cristais líquidos com anisotropia negativa se orientam perpendicularmente ao campo elétrico. A importância tecnológica da reorientação é óbvia: com uma simples variação do campo elétrico aplicado tem-se um meio comutável.

A reviravolta provocada pelo alquilcianobifenil marcou o início do que se tornou a multi-bilionária indústria internacional dos display's de cristal líquido (LCD). Primeiramente eles apareceram em relógios e calculadoras como números pretos contra um fundo opaco. Ao contrário dos diodos emissores de luz (LED) que eles substituíram, seu consumo elétrico é irrisório. Ao final da década de 80 entretanto, minúsculos aparelhos de televisão a cores começaram a aparecer, baseados em diferentes cristais líquidos. Atualmente os LCD's são utilizados em monitores de computador, celulares, projetores e aparelhos de TV que consomem muito menos energia que os tubos de raio catódico convencionais e as modernas TV's de plasma.

Mas estas aplicações tecnológicas mascararam a importância bem maior dos cristais líquidos. Algumas das quais só foram descobertas recentemente por biólogos que tentavam compreender suas propriedades[34].

Os cientistas agora sabem que as paredes das células vivas são constituídas de um tipo de cristal líquido chamado fosfolípido. Uma ilustração dramática da força e da vulnerabilidade é dada pelas bactérias que habitam as profundezas oceânicas sob toneladas de pressão por metro quadrado. Os fosfolípidos a estas pressões retêm suficiente estrutura de cristal líquido a temperatura ambiente para dar a membrana celular a força para resistir às tensões. Mas quando as bactérias são levadas para a superfície, alívio da pressão reduz a temperatura de transição de fase, e as paredes da membrana não podem

mais manterde sua estrutura. Ela torna-se líquida: a bactéria se desmancha e morre.

Cientistas descobriram que organismos vivos aprenderam a controlar as propriedades líquido-cristalinas de suas células com precisão, de modo que a temperatura crítica de transição para líquido puro está sempre um pouco acima da temperatura do ambiente. Pois, assim como as paredes da célula devem permanecer suficientemente fortes para proteger os conteúdos, elas devem também ser suficientemente permeáveis para permitir que os processos vitais continuem.

Os seres-humanos contam com as propriedades dos cristais líquidos naturais para o seu bomfuncionamento também. A ruptura da mielina provoca efeitos graves no sistema nervoso – incluindo esclerose múltipla. Embora a causa desse colapso ainda seja misterioso, pensa-se que ele esteja ligado às propriedades líquido-cristalinas da mielina, das quais sua qualidade isolante depende. uma falha na estrutura líquido-cristalino da mielina causa uma falência no isolamento, que arruina a transmissão de impulsos nervosos. A anemia falciforme – a enfermidade sanguínea na qual as os glóbulos vermelhos assumem formas peculiares e não funcionam devidamente – é outro exemplo da importância dos cristais líquidos. Por causa de defeitos genéticos, os portadores desta doença carregam em suas células sanguíneas moléculas de hemoglobina anormais com propriedades líquido cristalinas indesejadas. Estas moléculas dão às hemácias uma viscosidade que reduz drasticamente sua eficiência em carregar oxigênio, o que deixa os enfermos que sofrem dessa doença fracos e febris.

Também é possível que cristais líquidos naturais tenham um papel semelhante no câncer – essencialmente a multiplicação descontrolada das células, conhecido por iniciar-se em um órgão e se espalhar (metástase) pelo organismo todo. Comumente, as células saudáveis são cercadas por estruturas semelhantes a microtubos. Assim como os padrões regulares das moléculas de cristal líquido, estas estruturas parecem dar uma relativa rigidez estrutural que supões-se controlar o movimento das células. Nas células cancerosas, entretanto, esses microtúbulos não são tão ordenados, e portanto são menos hábeis em

interromper a fuga de células para outras partes do corpo. O conhecimento da razão destes microtubos terem propriedades de cristais líquidos, e porque eles as perdem, mostrar-se-á útil na guerra contra o câncer.

Estes são apenas alguns exemplos da importância que os cristais líquidos vêm assumindo nos últimos anos. Recentemente cientistas conseguiram aplicá-los no estudo da cosmologia, simulando com os cristais líquidos situações e eventos da escala do Universo. Fenômenos que ainda não foram observados, tais como lentes gravitacionais e a formação de singularidades, foram reproduzidos no laboratório com o uso de cristais líquidos[33,34].

Embora os cristais líquidos sejam conhecidos há muito tempo, só agora a sua real importância em diversas áreas do conhecimento humano está sendo descoberta. O presente trabalho visa ajudar a compreender um pouco mais estas substâncias fantásticas que nos sustentam vivos.

## CAPÍTULO 3

### GEOMETRIA DIFERENCIAL[32,38,40]

#### 3.1 INTRODUÇÃO

O objetivo deste capítulo é apresentar a ferramenta matemática que é utilizada ao longo deste trabalho. Desse modo aqueles que ainda não conhecem a geometria diferencial poderão encontrar nas páginas que seguem um material para se familiarizar com os termos e métodos deste ramo da matemática.

A geometria lida com o estudo das relações e propriedades de figuras que simbolizam corpos materiais[39-41]. Nem todas as propriedades são importantes. Interessam aquelas que são compartilhadas pelas figuras ditas congruentes. Duas figuras são consideradas congruentes se e apenas se uma delas puder ser colocada sobre a outra de forma que as duas figuras coincidam exatamente.

Para ressaltar quais atributos de uma figura são pertinentes à geometria, Felix Klein, um notável geômetra alemão do século XIX, afirmou: "*As propriedades geométricas de qualquer figura devem ser exprimíveis em fórmulas que não mudam quando mudamos o sistema de coordenadas. Inversamente, qualquer fórmula que nesse sentido é invariante sob um grupo de transformações de coordenadas deve representar uma propriedade geométrica*". Ou seja, a geometria trata do estudo de invariantes sob movimentos rígidos. Estes movimentos podem ser definidos como aqueles sob os quais os pontos de uma figura não se distanciam entre si. Considerando a incansável busca da termodinâmica pelos invariantes macroscópicos, e com a imagem da geometria acima delineada, fica evidente o uso desta no estudo das propriedades dos cristais líquidos por aquela.

Neste trabalho, os objetos matemáticos serão definidos em termos de suas propriedades de transformação sob mudança de sistema de coordenadas,

da mesma maneira que se faz em cálculo tensorial[37,42]. Além disso, a abordagem a ser feita se dará por meio de diferenciais, visto que a geometria trata de problemas locais. Para atingir uma extensão global seria preciso empregar a topologia[41].

Uma das principais questões da geometria é como formular uma definição e caracterização de uma superfície ou de um espaço[37]. Carl Friedrich Gauss descobriu que de fato a curvatura é uma propriedade intrínseca da superfície, o que corresponde a dizer que aquela pode ser calculada em termos de medições realizadas completamente dentro da superfície e sem referência ao espaço em volta. Motivado por tal descoberta, este capítulo se ocupará de explorar a curvatura de superfícies e estabelecer uma relação para ela.

### **3.2 CURVAS EM ESPAÇOS CURVOS**

A posição de qualquer ponto num espaço plano pode ser determinada pela intercessão de planos mutuamente ortogonais entre si; sendo que o número de planos que se interceptam deve ser igual ao número de dimensões do espaço. Cada um destes planos constitui uma família de planos paralelos entre si, que preenchem todo o espaço. Posto isso, para se identificar um outro ponto, basta obter a intercessão de outro conjunto de planos mutuamente ortogonais entre si e, um por vez, paralelos a cada um dos planos originais. A propósito, os versores normais a esses planos constituem a base ortonormal desse espaço Euclidiano. Isto é, eles formam um conjunto de vetores unitários reciprocamente ortogonais entre si, com os quais qualquer elemento desse espaço pode ser descrito[43].

Uma vez que se consegue localizar um ponto no espaço, pode-se avançar, e passar a descrever não apenas pontos isolados, mas conjuntos especiais formados por eles: curvas e superfícies – os objetos de interesse da

geometria diferencial. A equação de uma curva pode ser escrita na forma paramétrica:

$$\mathbf{r} = \mathbf{r}(t), \quad (1)$$

onde  $\mathbf{r}$  é o vetor que fornece a posição de um ponto  $(x_1, x_2, x_3)$  na curva. Na forma decomposta

$$\mathbf{r} = x_1(t) \mathbf{i} + x_2(t) \mathbf{j} + x_3(t) \mathbf{k} \quad (2)$$

Assume-se que  $\mathbf{r} = \mathbf{r}(t)$  possui derivadas de todas as ordens, e exclui-se o caso de  $\mathbf{r}$  constante. A curva representada pela equação paramétrica (1) é chamada curva analítica. Se  $d\mathbf{r}/dt \neq 0$  no ponto P, então o ponto P é chamado de ponto regular. Uma curva analítica composta de pontos regulares é chamada de curva analítica regular.

Pode ser mais conveniente, ao invés de relacionar uma curva ao parâmetro  $t$ ,  $t_1 \leq t \leq t_2$ , analisá-la em termos de um outro parâmetro  $s$ . Para garantir que a cada ponto da curva apenas um valor de  $s$  estará relacionado, faz-se mister que exista uma correspondência unívoca entre os parâmetros  $t$  e  $s$ . Por isso afirma-se que  $t$  é uma função analítica de  $s$ , ou seja,  $t = t(s)$ , com  $t_1 = t(s_1)$ ,  $t_2 = t(s_2)$  e  $dt/ds \neq 0$  em  $s_1 \leq s \leq s_2$ . Estas condições implicam que a função inversa  $s = s(t)$  existe e é analítica em  $t_1 \leq t \leq t_2$ , e que  $ds/dt$  não se anula em  $t_1 \leq t \leq t_2$ . Portanto, como há uma correspondência unívoca entre os pontos da curva e  $t$ , também existe uma correspondência unívoca entre os pontos da curva e  $s$ .

Um parâmetro freqüentemente utilizado é o comprimento de arco, que dá a distância, sobre a curva, entre dois pontos compreendidos na mesma. Do cálculo, o elemento de comprimento de arco é

$$ds = \sqrt{\left(\frac{dx_1}{dt}\right)^2 + \left(\frac{dx_2}{dt}\right)^2 + \left(\frac{dx_3}{dt}\right)^2} dt. \quad (3)$$

### 3.3 BASE MÓVEL

Seja P um ponto fixo, dado pelo vetor posição  $\mathbf{r}(t_p)$ , e Q um ponto variável, cujo vetor posição é  $\mathbf{r}(t)$ , ambos estando sobre uma curva. O vetor  $\overrightarrow{PQ} = \mathbf{r}(t) - \mathbf{r}(t_p)$  tem a mesma direção que o vetor

$$\frac{\mathbf{r}(t) - \mathbf{r}(t_p)}{t - t_p}.$$

À medida que  $t$  se aproxima de  $t_p$ , este vetor atingirá um limite, que, caso exista, é denotado por

$$\dot{\mathbf{r}} = \frac{d\mathbf{r}}{dt} = \lim_{t \rightarrow t_p} \frac{\mathbf{r}(t) - \mathbf{r}(t_p)}{t - t_p}.$$

O vetor  $d\mathbf{r}/dt$  tem a direção da tangente à curva no ponto P e sentido de  $t$  crescente.

O versor tangente  $\mathbf{T}$  é

$$\mathbf{T} = \frac{\dot{\mathbf{r}}}{|\dot{\mathbf{r}}|}. \quad (4)$$

Quando o parâmetro escolhido é o comprimento de arco  $s$ , têm-se que  $\mathbf{T} = \mathbf{r}'$ , pois  $ds^2 = dr^2$ , de modo que  $\mathbf{r}'$  é um vetor unitário. Neste caso o versor tangente aponta no sentido do crescimento do comprimento de arco.

Como o vetor  $\mathbf{T}$  tem uma unidade de comprimento, por definição, o vetor  $\mathbf{T}'$  expressa a taxa de mudança da direção de  $\mathbf{T}$  com relação ao comprimento de arco  $s$ . Logo, pelo fato de  $\mathbf{T}^2 = \mathbf{T} \cdot \mathbf{T} = 1$ , diferenciando, segue que:

$$\mathbf{T} \cdot \mathbf{T}' = 0.$$

Ou seja,  $\mathbf{T}'$  é perpendicular a  $\mathbf{T}$ . Em vista disso, pode-se escrever

$$\mathbf{T}' = \frac{d\mathbf{T}}{ds} = \kappa\mathbf{N}, \quad (5)$$

onde  $\mathbf{N}$  é um versor perpendicular a  $\mathbf{T}$ , ele é chamado de vetor normal principal. A direção de  $\mathbf{N}$  é escolhida de modo que  $\kappa$  seja não-negativo.

Outro vetor que pode ser definido é o binormal  $\mathbf{B}$ , que recebe esse nome pelo fato de ser ortogonal a ambos os vetores já definidos,  $\mathbf{T}$  e  $\mathbf{N}$ :

$$\mathbf{B} = \mathbf{T} \times \mathbf{N}$$

Dessa definição segue que

$$\mathbf{B}^2 = (\mathbf{T} \times \mathbf{N}) \cdot (\mathbf{T} \times \mathbf{N}) = 1,$$

ou seja,  $\mathbf{B}$  é um vetor unitário. Deste modo fica evidente que os vetores  $\mathbf{T}$ ,  $\mathbf{N}$  e  $\mathbf{B}$ , nesta ordem, formam um sistema dextrógiro de versores ortogonais em cada ponto da curva. Como os vetores  $\mathbf{T}$ ,  $\mathbf{N}$  e  $\mathbf{B}$  mudam de um ponto para outro ao longo da curva, o sistema de coordenadas com tais versores é chamado triedro móvel.

### 3.4 PLANOS DA BASE MÓVEL

Seja  $\mathbf{r}(t_p)$  o vetor posição de um ponto  $P$  numa curva. Os planos que contêm  $P$  e são perpendiculares a  $\mathbf{T}$ ,  $\mathbf{N}$  e  $\mathbf{B}$ , são nomeados, respectivamente, normal, retificante e osculante.

Seja  $\mathbf{r}(t)$  o vetor posição de um ponto arbitrário de cada um dos planos por turno. Então a equação do plano normal é

$$(\mathbf{r} - \mathbf{r}_P) \cdot \mathbf{T} = 0;$$

a equação do plano retificante é

$$(\mathbf{r} - \mathbf{r}_P) \cdot \mathbf{N} = 0;$$

e, a equação do plano osculante é

$$(\mathbf{r} - \mathbf{r}_P) \cdot \mathbf{B} = 0.$$

### 3.5 ORDEM DE CONTATO

O plano osculante a uma curva num ponto P é um plano tangente à curva em P. Em certo sentido (depende-se do conceito adotado), o plano osculante é mais próximo à curva do que qualquer outro plano tangente à curva em P. Para tal propósito far-se-a uso da idéia de ordem de contato de um plano e uma curva:

“Diz-se que uma curva  $\mathbf{r}=\mathbf{r}(s)$  e um plano  $(\mathbf{r}-\mathbf{a})\cdot\mathbf{b}=0$  com um ponto P em comum na localidade  $\mathbf{r}(s_0)$  têm contato de ordem  $n$  se e apenas se a distância de um ponto  $\mathbf{r}(s)$  da curva ao plano é uma função  $\delta(s)$  tal que

$$\begin{aligned} \delta^{(k)}(s_0) &= 0, \quad k = 0, 1, \dots, n; \\ \delta^{(n+1)}(s_0) &\neq 0, \end{aligned}$$

onde  $\delta^{(k)}$  denota a  $k$ -ésima derivada de  $\delta$  com relação a  $s$ .

A distância de um ponto  $\mathbf{r}(s)$  sobre uma curva até o plano osculante é

$$\delta(s) = \pm [\mathbf{r}(s) - \mathbf{r}(s_0)] \cdot \mathbf{B},$$

onde  $\mathbf{B} = \mathbf{B}(s_0)$  o versor binormal. Pode-se notar que a distância  $\delta$  é nula, haja vista que esta é a equação do plano osculante. Quanto às duas primeiras derivadas têm-se que:

$$\delta'(s_0) = \pm \mathbf{r}'(s_0) \cdot \mathbf{B}$$

e

$$\delta''(s_0) = \pm \mathbf{r}''(s_0) \cdot \mathbf{B}.$$

Como  $\mathbf{r}'(s_0) = \mathbf{T}$  e  $\mathbf{r}''(s_0) = \kappa \mathbf{N}$ , implica que:

$$\delta'(s_0) = \delta''(s_0) = 0.$$

Assim sendo, o plano osculante tem um contato com a curva de pelo menos duas ordens.

Supondo que exista um segundo plano tangente à curva no ponto P, sua equação será:

$$[\mathbf{r}(s) - \mathbf{r}(s_0)] \cdot \mathbf{A} = 0.$$

A distância  $\delta(s)$  de um ponto sobre a curva até o plano é

$$\delta(s) = \pm \frac{[\mathbf{r}(s) - \mathbf{r}(s_0)] \cdot \mathbf{A}}{\sqrt{A^2}}.$$

A derivada  $\delta'(s_0)$  e  $\delta''(s_0)$  são:

$$\delta'(s_0) = \pm \frac{\mathbf{r}'(s_0) \cdot \mathbf{A}}{\sqrt{A^2}},$$

$$\delta''(s_0) = \pm \frac{\mathbf{r}''(s_0) \cdot \mathbf{A}}{\sqrt{A^2}}.$$

Se ambas as derivadas se anulam, então  $\mathbf{A}$  é perpendicular a  $\mathbf{T}$  e  $\mathbf{N}$ ; conseqüentemente  $\mathbf{A}$  é paralelo a  $\mathbf{B}$ . Portanto a ordem de contato de qualquer plano que não seja osculante é menor que dois.

### 3.6 CÍRCULO OSCULANTE

A equação da esfera pode ser escrita na forma:

$$(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0)^2 = a^2, \quad (6)$$

onde  $\mathbf{r}_0$  é o vetor posição do centro da esfera.

Seja P, Q e R três pontos distintos sobre uma curva com  $\mathbf{r}''(s) \neq 0$ , e com vetores posição  $\mathbf{r}(s_0)$ ,  $\mathbf{r}(s_1)$  e  $\mathbf{r}(s_2)$  respectivamente. Ademais, por suposição, estes pontos se encontram sobre a esfera (6). É possível encontrar, à medida que Q e R se aproximam de P, as equações das esferas que contêm os três pontos citados.

Para obter esse resultado, pode-se definir uma função que forneça a distância de um ponto da curva até a superfície da esfera (6):

$$f(s) = |\mathbf{r}(s) - \mathbf{r}_0| - |a|,$$

onde  $s$  é o comprimento de arco da curva. Do fato de que os pontos P, Q e R se situam sobre a esfera decorre que

$$f(s_0) = f(s_1) = f(s_2) = 0.$$

Pelo teorema do valor médio segue que:

$$f'(\xi_1) = f'(\xi_2) = 0, \quad s_0 \leq \xi_1 \leq s_1 \leq \xi_2 \leq s_2.$$

E aplicando novamente este teorema a  $f'(s)$ :

$$f''(\xi_3) = 0, \quad \xi_1 \leq \xi_3 \leq \xi_2.$$

À medida que Q e R convergem para o ponto P,  $s_1$ ,  $s_2$ ,  $\xi_1$ ,  $\xi_2$  e  $\xi_3$  se aproximam de  $s_0$ . Portanto:

$$\begin{aligned} f(s_0) = 0 & \text{ ou } |\mathbf{r}(s_0) - \mathbf{r}_0| = |a|, \\ f'(s_0) = 0 & \text{ ou } \mathbf{r}'(s_0) \cdot |\mathbf{r}(s_0) - \mathbf{r}_0| = 0, \\ f''(s_0) = 0 & \text{ ou } \mathbf{r}''(s_0) \cdot |\mathbf{r}(s_0) - \mathbf{r}_0| + [\mathbf{r}'(s_0)]^2 = 0. \end{aligned} \quad (7)$$

Como  $\mathbf{r}' = \mathbf{T}$ , a segunda destas equações mostra que  $\mathbf{r}(s_0) - \mathbf{r}_0$  situa-se no plano normal à curva em P. Por isso pode-se expressar essa relação como uma combinação linear de  $\mathbf{N}$  e  $\mathbf{B}$ :

$$\mathbf{r}(s_0) - \mathbf{r}_0 = \lambda_1 \mathbf{N} + \lambda_2 \mathbf{B}. \quad (8)$$

Visto que  $r'' = \kappa \mathbf{N}$ , a última das equações (7) pode ser reescrita na forma:

$$\kappa \mathbf{N} \cdot [\mathbf{r}(s_0) - \mathbf{r}_0] + 1 = 0,$$

ou ainda

$$\mathbf{N} \cdot [\mathbf{r}(s_0) - \mathbf{r}_0] + \rho = 0, \quad (9)$$

onde  $\rho$  é o recíproco de  $\kappa$ , definido em (5); ou seja,  $\rho = 1/\kappa$ . Realizando o produto escalar da equação (8) com  $\mathbf{N}$ , obtém-se:

$$\lambda_1 = \mathbf{N} \cdot [\mathbf{r}(s_0) - \mathbf{r}_0],$$

de onde segue que, pela equação (9),  $\lambda_1 = -\rho$ . Elevando ao quadrado ambos os lados equação (8), obtém-se:

$$[\mathbf{r}(s_0) - \mathbf{r}_0]^2 = \lambda_1^2 + \lambda_2^2 = \lambda_2^2 + \rho^2.$$

Comparando este resultado com  $f(s_0) = 0$ ,

$$\lambda_2 = \pm \sqrt{a^2 - \rho^2}.$$

Finalmente obtém-se que:

$$\mathbf{r}_0 = \mathbf{r}(s_0) + \rho \mathbf{N} \pm \sqrt{a^2 - \rho^2} \mathbf{B}. \quad (10)$$

Portanto, para qualquer raio  $a > \rho$ , existem duas esferas cujos centros são dados pela equação (10). Para  $a = \rho$  a esfera tem seu centro no plano osculante. A intercessão desta esfera com o plano osculante é um círculo, de raio  $\rho$ , conhecido pelo nome de círculo osculante, ou ainda, círculo de curvatura. Porque  $\rho$  é o raio do círculo pelo qual a curva pode ser aproximada naquele ponto, ele é nomeado raio de curvatura; e  $\kappa$ , o recíproco de  $\rho$ , chama-se

curvatura, pois quantifica o quanto varia a direção da curva à medida que se caminha sobre ela.

### 3.7 FÓRMULAS DE FRENET

Além da curvatura pode-se encontrar outra quantidade imprescindível para se descrever uma curva no espaço. Para achá-la realiza-se procedimento análogo àquele utilizado para a obtenção de  $\kappa$ : inspecionar as derivadas dos versores base em relação ao comprimento de arco  $s$ .

Como os versores  $\mathbf{T}$ ,  $\mathbf{N}$  e  $\mathbf{B}$  são linearmente independentes, pode-se representar a derivada do vetor  $\mathbf{N}$  em função deles:

$$\mathbf{N}' = a_1 \mathbf{T} + a_2 \mathbf{N} + a_3 \mathbf{B};$$

a determinação dos coeficientes  $a_1$ ,  $a_2$  e  $a_3$  é a última porta que resta atravessar para encontrar aquilo que se busca nesta seção... Ora, o fato do vetor  $\mathbf{N}$  ser unitário implica que  $\mathbf{N}$  e  $\mathbf{N}'$  são perpendiculares:

$$\mathbf{N} \cdot \mathbf{N}' = 0,$$

diferenciando em relação a  $s$ :

$$2 \mathbf{N} \cdot \mathbf{N}' = 0,$$

e portanto

$$\mathbf{N} \cdot (a_1 \mathbf{T} + a_2 \mathbf{N} + a_3 \mathbf{B}) = 0.$$

Este resultado demonstra que  $a_2 = 0$ . Por causa disso:

$$\mathbf{N}' = a_1 \mathbf{T} + a_3 \mathbf{B}. \quad (11)$$

Multiplicando por  $\mathbf{T}$ :

$$\mathbf{T} \cdot \mathbf{N}' = \mathbf{T} \cdot (a_1 \mathbf{T} + a_3 \mathbf{B}) = a_1. \quad (12)$$

Basta diferenciar a relação de ortogonalidade  $\mathbf{T} \cdot \mathbf{N} = 0$  para descobrir o que representa  $\mathbf{T} \cdot \mathbf{N}'$ :

$$\begin{aligned} \mathbf{T} \cdot \mathbf{N}' + \mathbf{T}' \cdot \mathbf{N} &= 0 \\ \mathbf{T} \cdot \mathbf{N}' + \kappa \mathbf{N} \cdot \mathbf{N} &= 0, \end{aligned}$$

ou seja,

$$a_1 = \mathbf{T} \cdot \mathbf{N}' = -\kappa.$$

O valor do último coeficiente segue do produto vetorial

$$\mathbf{B} \cdot \mathbf{N}' = \mathbf{B} \cdot (a_1 \mathbf{T} + a_3 \mathbf{B}) = a_3, \quad (13)$$

que demanda diferenciar a relação de ortonormalidade  $\mathbf{B} \cdot \mathbf{N} = 0$ :

$$\mathbf{B} \cdot \mathbf{N}' + \mathbf{B}' \cdot \mathbf{N} = 0.$$

Para se compreender o significado desta relação, é mister que se descubra um modo de representar  $\mathbf{B}'$  em função de quantidades conhecidas. Ao derivar a relação de ortogonalidade  $\mathbf{B} \cdot \mathbf{T} = 0$  obtém-se:

$$\mathbf{T} \cdot \mathbf{B}' = -\mathbf{T}' \cdot \mathbf{B} = -\kappa \mathbf{N} \cdot \mathbf{B} = 0,$$

ou seja,  $\mathbf{T}$  e  $\mathbf{B}$  são perpendiculares. A partir do carácter unitário do vetor  $\mathbf{B}$ , descobre-se também que este versor é perpendicular a  $\mathbf{B}'$

$$\mathbf{B} \cdot \mathbf{B}' = 0.$$

Como  $\mathbf{N}$  também é perpendicular a  $\mathbf{T}$  e  $\mathbf{B}$ , então pode-se dizer que:

$$\mathbf{B}' = \tau \mathbf{N},$$

onde a constante de proporcionalidade  $\tau$  é nomeada torção da curva no ponto, pois à medida que se percorre a curva, o vetor  $\mathbf{B}'$  torce o versor  $\mathbf{B}$  na direção de  $\mathbf{N}$ , provocando, com o movimento ao longo da curva, uma torção do plano osculante e da própria curva.

Em posse dessa informação, e juntando as equações (11), (12) e (13), pode-se expressar apropriadamente o versor  $\mathbf{N}'$  em termos de  $\mathbf{T}$  e  $\mathbf{B}$ :

$$\mathbf{N}' = -\kappa \mathbf{T} + \tau \mathbf{B}.$$

Dá-se o nome de Fórmulas de Frenet-Serret ao conjunto de equações que relacionam os versores da base ortonormal  $\mathbf{T}$ ,  $\mathbf{N}$  e  $\mathbf{B}$  com suas derivadas  $\mathbf{T}'$ ,  $\mathbf{N}'$  e  $\mathbf{B}'$ :

$$\begin{aligned} \mathbf{T}' &= \kappa \mathbf{N}, \\ \mathbf{N}' &= -\kappa \mathbf{T} + \tau \mathbf{B}, \\ \mathbf{B}' &= -\tau \mathbf{N}. \end{aligned} \tag{14}$$

### 3.8 EQUAÇÕES NATURAIS DO ESPAÇO CURVO

Duas curvas são congruentes se, com um movimento rígido, elas forem colocadas uma sobre a outra e coincidirem exatamente. Certas propriedades características da curva, tais como a curvatura  $\kappa$  e a torção  $\tau$ , permanecem inalteradas durante o movimento. Como elas são função da posição dos pontos na curva, podem ser expressa em função do comprimento de arco  $s$  em relação a algum ponto de referência sobre a curva. As equações

$$\kappa = \kappa(s) \quad \text{e} \quad \tau = \tau(s)$$

são conhecidas como as equações intrínsecas, ou naturais, da curva, pois fornecem informações a respeito da curva por meio de quantidades que podem ser obtidas sobre a própria curva, não sendo preciso recorrer a mensurações feitas num espaço de dimensões superiores às da curva.

Pode-se mostrar que duas equações com as mesmas equações naturais são congruentes. Considere duas curvas  $\mathbf{r} = \mathbf{r}_1(s)$  e  $\mathbf{r} = \mathbf{r}_2(s)$ . Com um movimento rígido coloca-se o ponto de referência de ambas as curvas em coincidência, de forma que os triedros móveis de cada uma coincidam nesse ponto. Pelas fórmulas de Frenet (14):

$$\frac{d}{ds} (\mathbf{T}_1 \cdot \mathbf{T}_2 + \mathbf{N}_1 \cdot \mathbf{N}_2 + \mathbf{B}_1 \cdot \mathbf{B}_2) = \mathbf{T}_1 \cdot \kappa_2 \mathbf{N}_2 + \kappa_1 \mathbf{N}_1 \cdot \mathbf{T}_2 + \mathbf{N}_1 \cdot (-\kappa_2 \mathbf{T}_2 + \tau_2 \mathbf{N}_2) + \mathbf{N}_2 \cdot (-\kappa_1 \mathbf{T}_1 + \tau_1 \mathbf{N}_1) - \mathbf{B}_1 \cdot \tau_2 \mathbf{N}_2 - \mathbf{B}_2 \cdot \tau_1 \mathbf{N}_1.$$

Como, por hipótese,  $\kappa_1 = \kappa_2$  e  $\tau_1 = \tau_2$ , segue que

$$\mathbf{T}_1 \cdot \mathbf{T}_2 + \mathbf{N}_1 \cdot \mathbf{N}_2 + \mathbf{B}_1 \cdot \mathbf{B}_2 = \text{constante}.$$

Mas, em  $s = 0$ ,

$$\mathbf{T}_1 = \mathbf{T}_2 \quad \mathbf{N}_1 = \mathbf{N}_2 \quad \mathbf{B}_1 = \mathbf{B}_2;$$

portanto, em  $s = 0$ ,

$$\mathbf{T}_1 \cdot \mathbf{T}_2 + \mathbf{N}_1 \cdot \mathbf{N}_2 + \mathbf{B}_1 \cdot \mathbf{B}_2 = 3. \quad (15)$$

Como os vetores  $\mathbf{T}$ ,  $\mathbf{N}$  e  $\mathbf{B}$  são unitários e visto que a soma de seus produtos escalares na equação (15) é três, segue que para todo  $s$

$$\mathbf{T}_1 \cdot \mathbf{T}_2 = \mathbf{N}_1 \cdot \mathbf{N}_2 = \mathbf{B}_1 \cdot \mathbf{B}_2 = 1,$$

e

$$\mathbf{T}_1 = \mathbf{T}_2 \quad \mathbf{N}_1 = \mathbf{N}_2 \quad \mathbf{B}_1 = \mathbf{B}_2.$$

Da igualdade  $\mathbf{T}_1 = \mathbf{T}_2$ , obtém-se

$$\mathbf{T}_1' = \mathbf{T}_2',$$

e conseqüentemente,

$$\mathbf{r}_1 = \mathbf{r}_2 + \mathbf{c},$$

onde  $\mathbf{c}$  é um vetor constante de integração. Para determiná-lo, utiliza-se as condições iniciais  $\mathbf{r}_1(0) = \mathbf{r}_2(0)$ , que implica em  $\mathbf{c} = \mathbf{0}$ . Portanto, para todo  $s$

$$\mathbf{r}_1 = \mathbf{r}_2,$$

e o teorema está provado.

### 3.9 ESPAÇO BIDIMENSIONAL CURVO

Qualquer superfície tem uma dimensão a mais que uma curva. Portanto apenas um parâmetro não é suficiente para localizar adequadamente um ponto sobre qualquer superfície; uma representação paramétrica apropriada de superfícies deve ser feita em relação a dois parâmetros  $u$  e  $v$ :

$$x_1 = x_1(u, v), \quad x_2 = x_2(u, v), \quad x_3 = x_3(u, v). \quad (16)$$

A eliminação dos parâmetros  $u$  e  $v$  geralmente resulta numa equação com a forma:

$$F(x_1, x_2, x_3) = 0. \quad (17)$$

Entretanto, a exclusão desses parâmetros nem sempre resulta numa relação com a estrutura da equação (17). Por exemplo, tomando-se as duas primeiras equações (16), para que seja possível resolvê-las em  $u$  e  $v$  em termos de  $x_1$  e  $x_2$ , é preciso que o jacobiano  $J(x_1, x_2 | u, v)$  seja diferente de zero. Se apenas  $J(x_1, x_2 | u, v) = 0$ , então pode-se resolver o sistema de equações em  $u$  e  $v$  em termos de  $x_1$  e  $x_3$  ou em termos de  $x_2$  e  $x_3$ . Ou seja, para se obter a equação (17), pelo menos um dos jacobianos não pode se anular. Considerando a matriz

$$\begin{pmatrix} \frac{\partial x_1}{\partial u} & \frac{\partial x_2}{\partial u} & \frac{\partial x_3}{\partial u} \\ \frac{\partial x_1}{\partial v} & \frac{\partial x_2}{\partial v} & \frac{\partial x_3}{\partial v} \end{pmatrix}, \quad (18)$$

o requerimento acima citado equivale a dizer que pelo menos um dos determinantes de segunda ordem deve ser diferente de zero. Neste caso a matriz é de segunda ordem.

Se as três funções  $x_1$ ,  $x_2$  e  $x_3$  são constantes, então têm-se um ponto. Nessa situação todas as derivadas parciais na matriz (18) são nulas e a sua ordem é zero.

Um outro caso é aquele em que as funções são relacionadas de tal forma que elas são redutíveis a funções de um único parâmetro,  $t = t(u, v)$ . Trata-se de uma curva, e os elementos da matriz jacobiana podem se reescritos do seguinte modo:

$$\begin{pmatrix} \frac{\partial x_1}{\partial t} \frac{\partial t}{\partial u} & \frac{\partial x_2}{\partial t} \frac{\partial t}{\partial u} & \frac{\partial x_3}{\partial t} \frac{\partial t}{\partial u} \\ \frac{\partial x_1}{\partial t} \frac{\partial t}{\partial v} & \frac{\partial x_2}{\partial t} \frac{\partial t}{\partial v} & \frac{\partial x_3}{\partial t} \frac{\partial t}{\partial v} \end{pmatrix},$$

e uma inspeção desta matriz mostra que todo determinante de segunda ordem é zero; assim essa é uma matriz de posto um.

Pode-se, em vista da discussão acima, concluir que a ordem da matriz jacobiana (18) determina o que as equações (16) representam: uma superfície, uma curva, ou um ponto.

Seja  $\mathbf{r}$  o vetor posição do ponto  $P(x_1, x_2, x_3)$  localizado sobre a superfície S dada pela equação (17). Então

$$\mathbf{r} = \mathbf{r}(u, v),$$

$$d\mathbf{r} = \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial u} du + \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial v} dv.$$

As derivadas parciais  $\partial \mathbf{r} / \partial u$  e  $\partial \mathbf{r} / \partial v$  definem duas direções tangentes à superfície S no ponto P. Assim elas definem o plano tangente a S em P, cujo vetor normal é

$$\mathbf{N} = \frac{\frac{\partial \mathbf{r}}{\partial u} \times \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial v}}{\left| \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial u} \times \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial v} \right|}.$$

Este versor, juntamente com as derivadas  $\partial \mathbf{r} / \partial u$  e  $\partial \mathbf{r} / \partial v$ , define um sistema de referência que varia ponto a ponto sobre  $S$ . Se  $u = \text{cte}$ , então

$$d\mathbf{r} = \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial v} dv,$$

e as equações  $x_1 = x_1(c, v)$ ,  $x_2 = x_2(c, v)$  e  $x_3 = x_3(c, v)$  representam uma curva sobre a superfície  $S$ , formada pela interseção desta com o plano  $u = \text{cte}$ . Se  $v$  também for constante, então obtêm-se uma outra curva que intercepta a primeira no ponto  $P$ . Por isso,  $u$  e  $v$  são chamadas coordenadas curvilíneas de superfície.

Como a matriz jacobiana (18) é de posto dois, infere-se que  $\partial \mathbf{r} / \partial u \times \partial \mathbf{r} / \partial v$  é diferente de zero sobre toda a superfície. Assim sendo, os vetores  $\partial \mathbf{r} / \partial u$  e  $\partial \mathbf{r} / \partial v$  não são nem paralelos, e portanto, ao atribuir valores a  $u$  e  $v$ , pode-se alterar  $d\mathbf{r}$  de forma a dar-lhe qualquer direção que se queira no plano tangente.

O elemento de arco  $ds$  na superfície  $\mathbf{r} = \mathbf{r}(u, v)$ , chamado de primeira forma fundamental da superfície, é dado por

$$ds^2 = d\mathbf{r} \cdot d\mathbf{r} = \left( \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial u} \right)^2 du^2 + 2 \left( \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial u} \cdot \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial v} \right) du dv + \left( \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial v} \right)^2 dv^2 \quad (19)$$

ou, escrita de forma compacta com a notação de soma de Einstein:

$$ds^2 = \frac{\partial x_1}{\partial q_i} \frac{\partial x_m}{\partial q_j} \delta^{im} dq_i dq_j = g^{ij} dq_i dq_j$$

onde  $\delta^{im}$  dá as componentes da matriz identidade  $\mathbf{1}$ ;

$$g^{ij} = \frac{\partial x_1}{\partial q_i} \frac{\partial x_m}{\partial q_j} \delta^{im}$$

é a métrica, com  $i$  e  $j$  variando de um a dois, pois o espaço considerado nesta seção é bidimensional, suas componentes são as quantidades fundamentais de primeira ordem; e  $q_1 = u$  e  $q_2 = v$ . Se  $\partial \mathbf{r} / \partial q_1$  e  $\partial \mathbf{r} / \partial q_2$  forem perpendiculares, então

$g^{ij} = 0$  para  $i \neq j$ , e a base vetorial formada por  $\partial \mathbf{r} / \partial q_1$ ,  $\partial \mathbf{r} / \partial q_2$  e  $\partial \mathbf{r} / \partial q_1 \times \partial \mathbf{r} / \partial q_2$  é ortogonal; ela pode ser reescrita em termos das componentes da métrica, como se segue:

$$\frac{\partial \mathbf{r}}{\partial q_1} = \sqrt{g^{11}} \mathbf{e}_1, \quad \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial q_2} = \sqrt{g^{22}} \mathbf{e}_2, \quad \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial q_1} \times \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial q_2} = \sqrt{g} \mathbf{e}_3,$$

onde  $g = g^{11} g^{22}$  é o determinante da métrica; os versores assim definidos também constituem uma base ortonormal  $(\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2, \mathbf{e}_3)$  em cada ponto da superfície.

A métrica especifica a natureza do sistema de coordenadas e é suficiente para caracterizar um espaço curvo. Por exemplo, num plano a distância entre dois pontos é dada pela lei de Pitágoras

$$ds^2 = dq_1^2 + dq_2^2.$$

Comparando-a com a primeira forma fundamental da superfície, equação (19), conclui-se que a derivada de  $s$  em relação a ambas coordenadas é igual a um, ou seja, a métrica é equivalente à matriz identidade:

$$g^{ij} = \delta^{ij} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

A forma da métrica está sujeita ao sistema de coordenadas eleito para representar o espaço. Por isso a descrição da curvatura de uma superfície em termos da função métrica é inconveniente. Mas existe uma função que depende exclusivamente das propriedades intrínsecas da superfície. Ela é encontrada ao se retratar uma superfície através da métrica e suas derivadas. Ao adotá-la fica evidente o caráter geométrico da curvatura, pois esta passa a ser descrita sem referência a nenhuma quantidade externa à própria superfície; torna-se independente de qualquer sistema de coordenadas.

Os vetores  $\partial \mathbf{r} / \partial q_1$ ,  $\partial \mathbf{r} / \partial q_2$  e  $\mathbf{N}$  são linearmente independentes. Portanto as derivadas da função métrica podem ser escritas em termos deles:

$$\begin{aligned}\frac{\partial^2 \mathbf{r}}{\partial q_1^2} &= \frac{\partial}{\partial q_1} (\sqrt{g^{11}} \mathbf{e}_1) = a_1 \mathbf{e}^1 + a_2 \mathbf{e}^2 + a_3 \mathbf{e}^3, \\ \frac{\partial^2 \mathbf{r}}{\partial q_2^2} &= \frac{\partial}{\partial q_2} (\sqrt{g^{22}} \mathbf{e}_2) = b_1 \mathbf{e}^1 + b_2 \mathbf{e}^2 + b_3 \mathbf{e}^3, \\ \frac{\partial^2 \mathbf{r}}{\partial q_1 \partial q_2} &= c_1 \mathbf{e}^1 + c_2 \mathbf{e}^2 + c_3 \mathbf{e}^3.\end{aligned}$$

Mais adiante, ver-se-á, que, para o cálculo da curvatura, são importantes apenas os coeficientes  $a_3, b_3, c_3$ , chamados de quantidades fundamentais de segunda ordem:

$$a_3 = N \cdot \frac{\partial^2 \mathbf{r}}{\partial q_1^2}, \quad b_3 = N \cdot \frac{\partial^2 \mathbf{r}}{\partial q_2^2} \quad \text{e} \quad c_3 = N \cdot \frac{\partial^2 \mathbf{r}}{\partial q_1 \partial q_2} \quad (20)$$

A diferenciação de  $N \cdot \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial q_1} = 0$  e  $N \cdot \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial q_2} = 0$  com relação a  $q_1$  e a  $q_2$  resulta em:

$$\begin{aligned}\frac{\partial N}{\partial q_1} \cdot \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial q_1} + N \cdot \frac{\partial^2 \mathbf{r}}{\partial q_1^2} &= 0, \\ \frac{\partial N}{\partial q_2} \cdot \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial q_1} + N \cdot \frac{\partial^2 \mathbf{r}}{\partial q_1 \partial q_2} &= 0, \\ \frac{\partial N}{\partial q_1} \cdot \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial q_2} + N \cdot \frac{\partial^2 \mathbf{r}}{\partial q_1 \partial q_2} &= 0, \\ \frac{\partial N}{\partial q_2} \cdot \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial q_2} + N \cdot \frac{\partial^2 \mathbf{r}}{\partial q_2^2} &= 0.\end{aligned}$$

Ajuntando as equações (20) com estas expressões obtém-se:

$$\begin{aligned}\frac{\partial N}{\partial q_1} \cdot \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial q_1} &= -a_3, \\ \frac{\partial N}{\partial q_1} \cdot \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial q_2} &= \frac{\partial N}{\partial q_2} \cdot \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial q_1} = -c_3, \\ \frac{\partial N}{\partial q_2} \cdot \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial q_2} &= -b_3.\end{aligned} \quad (21)$$

Num triângulo retângulo, a razão entre um dos catetos e a hipotenusa informa a inclinação desta em relação ao outro cateto. A curvatura da superfície num ponto P, localizado pelo vetor posição  $\mathbf{r}(q_1, q_2)$ , pode ser obtida de maneira análoga. Basta relacionar a distância de um ponto Q vizinho a P, situado pelo vetor posição  $\mathbf{r}(q_1 + \Delta q_1, q_2 + \Delta q_2)$ , com o elemento de comprimento de arco ds. Este já é conhecido, aquele é obtido pela projeção:

$$\delta = \Delta \mathbf{r} \cdot \mathbf{N},$$

onde  $\mathbf{N}$  é o versor normal à superfície em P e

$$\Delta \mathbf{r} = \mathbf{r}(q_1 + \Delta q_1, q_2 + \Delta q_2) - \mathbf{r}(q_1, q_2).$$

A expansão de  $\Delta \mathbf{r}$  numa série de Taylor resulta em

$$\begin{aligned} \Delta \mathbf{r} = & \left( \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial q_1} \Delta q_1 + \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial q_2} \Delta q_2 \right) + \\ & \frac{1}{2!} \left( \frac{\partial^2 \mathbf{r}}{\partial q_1^2} \Delta q_1^2 + 2 \frac{\partial^2 \mathbf{r}}{\partial q_1 \partial q_2} \Delta q_1 \Delta q_2 + \frac{\partial^2 \mathbf{r}}{\partial q_2^2} \Delta q_2^2 \right) + \dots \end{aligned}$$

Se forem considerados até termos de segunda ordem obtém-se, pelas igualdades (21):

$$\begin{aligned} 2 \delta = \mathbf{N} \cdot & \left( \frac{\partial^2 \mathbf{r}}{\partial q_1^2} \Delta q_1^2 + 2 \frac{\partial^2 \mathbf{r}}{\partial q_1 \partial q_2} \Delta q_1 \Delta q_2 + \frac{\partial^2 \mathbf{r}}{\partial q_2^2} \Delta q_2^2 \right) \\ & = a_3 \Delta q_1^2 + c_3 \Delta q_1 \Delta q_2 + b_3 \Delta q_2^2. \end{aligned}$$

Esta expressão é conhecida como segunda forma fundamental da superfície. Dividindo este termo pelo comprimento de arco  $ds^2$  chega-se a uma expressão para a curvatura da superfície num ponto P:

$$\kappa = C \frac{a_3 dq_1^2 + c_3 dq_1 dq_2 + b_3 dq_2^2}{g^{11} dq_1^2 + g^{12} dq_1 dq_2 + g^{22} dq_2^2}.$$

Também se chega a esta mesma conclusão através de outro raciocínio: para uma curva numa superfície:

$$\mathbf{T} \cdot \mathbf{N} = 0. \quad (22)$$

Seja  $\mathbf{n}$  a normal principal à curva. A diferenciação da equação (22) em relação ao comprimento de arco  $s$  produz:

$$\mathbf{T}' \cdot \mathbf{N} + \mathbf{T} \cdot \mathbf{N}' = 0,$$

que, pelo uso das fórmulas de Frenet-Serret (14), torna-se:

$$\kappa \mathbf{n} \cdot \mathbf{N} + \mathbf{r}' \cdot \mathbf{N}' = 0.$$

Portanto

$$\kappa \mathbf{n} \cdot \mathbf{N} = \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial s} \cdot \frac{\partial \mathbf{N}}{\partial s} = \frac{\partial \mathbf{r} \cdot \partial \mathbf{N}}{\partial s^2}.$$

Como

$$d\mathbf{r} = \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial q_1} dq_1 + \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial q_2} dq_2$$

e

$$d\mathbf{N} = \frac{\partial \mathbf{N}}{\partial q_1} dq_1 + \frac{\partial \mathbf{N}}{\partial q_2} dq_2,$$

então o produto escalar

$$\begin{aligned} d\mathbf{r} \cdot d\mathbf{N} = & \\ \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial q_1} \cdot \frac{\partial \mathbf{N}}{\partial q_1} dq_1^2 + \left( \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial q_1} \cdot \frac{\partial \mathbf{N}}{\partial q_2} + \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial q_2} \cdot \frac{\partial \mathbf{N}}{\partial q_1} \right) dq_1 dq_2 + \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial q_2} \cdot \frac{\partial \mathbf{N}}{\partial q_2} dq_2^2. & \end{aligned}$$

Substituindo os coeficientes pelos valores dados pelas equações (21) chega-se a:

$$-d\mathbf{r} \cdot d\mathbf{N} = a_3 dq_1^2 + c_3 dq_1 dq_2 + b_3 dq_2^2 = 2 \delta,$$

e, finalmente

$$\kappa \mathbf{n} \cdot \mathbf{N} = \frac{a_3 dq_1^2 + c_3 dq_1 dq_2 + b_3 dq_2^2}{g^{11} dq_1^2 + g^{12} dq_1 dq_2 + g^{22} dq_2^2}. \quad (23)$$

O lado direito desta equação depende apenas do ponto  $(q_1, q_2)$  e da direção definida por  $du/dv$ . Assim sendo,  $\kappa \mathbf{n} \cdot \mathbf{N}$  é o mesmo para toda curva que passe por aquele ponto e tenha a mesma direção nesse ponto.

Como ambos  $\mathbf{n}$  e  $\mathbf{N}$  são perpendiculares a  $\mathbb{T}$ , o ângulo  $\theta$  entre  $\mathbf{n}$  e  $\mathbf{N}$  é o ângulo entre  $\mathbf{n}$  e o plano osculante. Como  $\kappa \mathbf{n} \cdot \mathbf{N}$  é constante num

ponto, então para todas as curvas formadas pelas seções de planos com a superfície que contém  $\mathbb{T}$

$$\kappa \cos \theta = \text{constante.}$$

Em particular, a curva formada pela interseção da superfície com o plano de  $\mathbb{T}$  e  $n$  tem  $\cos \theta = \pm 1$ . Se  $\kappa_n$  é a sua curvatura, então

$$|\kappa \cos \theta| = \kappa_n.$$

Seja  $\lambda = dq_1/dq_2$ , então a equação (23) torna-se

$$\frac{1}{R} = \frac{a_3 \lambda^2 + c_3 \lambda + b_3}{g^{11} \lambda^2 + g^{12} \lambda + g^{22}}, \quad (24)$$

onde  $R = \pm \rho_n = \pm 1/\kappa_n$ . Como os coeficientes desta expressão são quantidades fixas num dado ponto,  $R$  é função apenas de  $\lambda$ , isto é, da direção determinada por  $dq_1/dq_2$ . Ao calcular os valores de  $\lambda$  para os quais a derivada  $d(1/R)/d\lambda$  é nula, encontra-se as direções em que  $R$  é máximo e mínimo:

$$\lambda^2 (g^{12} a_3 - g^{11} c_3) + \lambda (g^{22} a_3 - g^{11} b_3) + (g^{22} c_3 - g^{12} b_3) = 0. \quad (25)$$

As duas soluções para  $\lambda$  são chamadas direções principais no ponto. Substituindo estes dois valores na equação (24), obtém-se os raios principais de curvatura da superfície naquele ponto. A sua soma é dada por

$$2H = \frac{1}{R_1} + \frac{1}{R_2} = \frac{g^{11} b_3 - 2g^{12} c_3 + g^{22} a_3}{g^{11} g^{22} - (g^{12})^2},$$

e o produto desses raios de curvatura é

$$K = \frac{1}{R_1 R_2} = \frac{a_3 b_3 - (c_3)^2}{g}.$$

As quantidades  $H$  e  $K$  são conhecidas como curvatura média (extrínseca) e curvatura de Gauss (intrínseca) respectivamente.

Numa dada superfície, é chamada linha de curvatura qualquer curva cuja tangente em todos os pontos tenha a direção principal, isto é, a direção para a qual a curvatura é máxima ou mínima naquele ponto. Estas curvas são obtidas a partir da equação (25). Uma condição necessária e suficiente de que as linhas de curvatura sejam as linhas paramétricas, definidas por  $q_1$  e  $q_2$ , é  $g^{12} = c_3 = 0$ .

Isto pode ser provado supondo que as linhas de curvatura são as curvas paramétricas. Como estas são ortogonais,  $g^{12} = 0$ . Conseqüentemente elas são representadas por  $q_1 = \text{cte}_1$  e  $q_2 = \text{cte}_2$ . Então as equações diferenciais destas curvas são  $dq_1 = 0$  e  $dq_2 = 0$ . Que implica em  $dq_1 dq_2 = 0$ . Então, a partir da equação (25), deduz-se que:

$$g^{12} a_3 - g^{11} c_3 = g^{22} c_3 - g^{12} b_3 = 0,$$

ou, como  $g^{12} = 0$ ,

$$g^{11} c_3 = g^{22} c_3 = 0.$$

Visto que  $g^{11}$  e  $g^{22}$  não são nulos, então  $c_3 = 0$ .

Com estas considerações e escrevendo os coeficientes  $a_3$  e  $b_3$  em função dos coeficientes da métrica, a curvatura de Gauss assume a forma:

$$K = -\frac{1}{2g} \left( \frac{\partial^2 g^{11}}{\partial q_2^2} + \frac{\partial^2 g^{22}}{\partial q_1^2} \right) + \frac{g^{22}}{4g^2} \left( \frac{\partial g^{11}}{\partial q_1} \frac{\partial g^{22}}{\partial q_1} + \left( \frac{\partial g^{11}}{\partial q_1} \right)^2 \right) + \frac{g^{11}}{4g^2} \left( \frac{\partial g^{11}}{\partial q_2} \frac{\partial g^{22}}{\partial q_2} + \left( \frac{\partial g^{22}}{\partial q_1} \right)^2 \right), \quad (26)$$

que é independente do sistema de coordenadas adotado. Ela é uma função válida em cada ponto da superfície, e depende unicamente da superfície em questão.

### 3.10 ESPAÇO N-DIMENSIONAL CURVO

Sabe-se que uma porção extremamente pequena de uma curva pode ser aproximada por uma reta. Do mesmo modo, para qualquer espaço curvo de dimensões arbitrárias, pode-se encontrar um sistema de coordenadas para o qual, numa porção diminuta de sua extensão, é válido o teorema de Pitágoras, isto é, o espaço pode ser tratado como se fosse plano. Mas isto só é válido para pequenas regiões, que compreendam um ponto e sua vizinhança, ou seja, esse sistema cartesiano de coordenadas só tem validade local, não pode ser aplicado globalmente, em todo o espaço.

Certa vez Gauss argumentou que todas as propriedades inerente de um espaço curvo podem ser descritas em termos das derivadas  $\partial x_a / \partial q_b$  da função  $x_a(q)$  que define a transformação  $q \rightarrow x$  de coordenadas de algum sistema de coordenadas curvilíneo geral  $q_b$  que cobre todo espaço para o sistema cartesiano  $x_a$  local[32].

Num espaço Euclidiano é válida a relação

$$ds^2 = dx_1^2 + dx_2^2 + \dots = \delta^{ab} dx_a dx_b,$$

que define a distância entre dois pontos. A menor distância entre esses pontos, nesse espaço, é uma reta, descrita pela equação

$$\frac{d^2 x_a}{ds^2} = 0.$$

Esta reta pode ser a aproximação de uma curva num ponto, vista de um referencial local  $x_a(q)$ . Então, quando ela for observada de um sistema de coordenadas curvilíneo global:

$$\begin{aligned} 0 &= \frac{d}{ds} \left( \frac{\partial x_a}{\partial q_m} \frac{dq_m}{ds} \right) \\ &= \frac{\partial x_a}{\partial q_m} \frac{d^2 q_m}{ds^2} + \frac{\partial^2 x_a}{\partial q_m \partial q_n} \frac{dq_n}{ds} \frac{dq_m}{ds} \end{aligned}$$

Multiplicando por  $\partial q_1 / \partial x_a$ , e utilizando a regra do produto

$$\frac{\partial x_a}{\partial q_m} \frac{\partial q_1}{\partial x_a} = \delta^m_1,$$

resulta a expressão:

$$\frac{d^2 q_1}{ds^2} + \Gamma_1^{mn} \frac{dq_n}{ds} \frac{dq_m}{ds}, \quad (27)$$

onde  $\Gamma_1^{mn}$  é a chamada conexão afim, definida por

$$\Gamma_1^{mn} = \frac{\partial^2 x_a}{\partial q_m \partial q_n} \frac{\partial q_1}{\partial x_a}. \quad (28)$$

o significado de seu nome ficará evidente mais adiante. Antes será investigado a que classe de entidade matemática a conexão afim  $\Gamma_1^{mn}$  pertence, através de suas propriedades de transformação numa transformação de variáveis.

Numa mudança de sistema de coordenadas  $q_m \rightarrow q'_m$  a base ortonormal se transforma conforme a regra

$$\begin{aligned} e'^1 &= \frac{\partial \mathbf{r} / \partial u_1}{|\partial \mathbf{r} / \partial u_1|} \\ &= \frac{(\partial x_1 / \partial u_1) e^1 + (\partial x_2 / \partial u_1) e^2 + (\partial x_3 / \partial u_1) e^3}{\sqrt{(\partial x_1 / \partial u_1)^2 + (\partial x_2 / \partial u_1)^2 + (\partial x_3 / \partial u_1)^2}}, \end{aligned}$$

isto é,

$$e'^1 = C \frac{\partial q_j}{\partial q'^1} e^j.$$

Todo objeto que se transforma de acordo com essa mesma regra é chamado de covariante. Por exemplo, o gradiente é um vetor covariante

$$\frac{\partial \phi}{\partial q'^m} = \frac{\partial q_n}{\partial q'^m} \frac{\partial \phi}{\partial q_n},$$

pois segundo a fórmula de transformação

$$V'^m = \frac{\partial q_n}{\partial q'_m} V^n.$$

Por outro lado, todo aquele que se transforma segundo a regra contrária é dito contravariante:

$$U'_m = \frac{\partial q'_m}{\partial q_n} U_n.$$

Uma amostra de vetor contravariante é a diferencial das coordenadas

$$dq'_m = \frac{\partial q'_m}{\partial q_n} dq_n.$$

No caso da conexão afim  $\Gamma_I^{mn}$ , definida por (28):

$$\Gamma_I^{mn} = \frac{\partial^2 x_a}{\partial q_m \partial q_n} \frac{\partial q_1}{\partial x_a},$$

onde  $x_a(q)$  refere-se ao sistema local de coordenadas Euclidiano. Passando de  $q_m$  para um outro sistema  $q'_m$ , encontra-se

$$\begin{aligned} \Gamma_I'^{mn} &= \frac{\partial q'_1}{\partial x_a} \frac{\partial^2 x_a}{\partial q_m \partial q_n} \\ &= \frac{\partial q'_1}{\partial q_r} \frac{\partial q_r}{\partial x_a} \frac{\partial}{\partial q'_m} \left( \frac{\partial q_s}{\partial q'_n} \frac{\partial x_a}{\partial q_s} \right) \\ &= \frac{\partial q'_1}{\partial q_r} \frac{\partial q_r}{\partial x_a} \left( \frac{\partial^2 q_s}{\partial q'_m \partial q'_n} \frac{\partial x_a}{\partial q_s} + \frac{\partial q_s}{\partial q'_n} \frac{\partial q_t}{\partial q'_m} \frac{\partial^2 x_a}{\partial q_s \partial q_t} \right), \end{aligned}$$

e comparando com a equação (28):

$$\Gamma_I'^{mn} = \frac{\partial q'_1}{\partial q_r} \frac{\partial^2 q_r}{\partial q'_m \partial q'_n} + \frac{\partial q'_1}{\partial q_r} \frac{\partial q_s}{\partial q'_n} \frac{\partial q_t}{\partial q'_m} \Gamma_r^{ts}. \quad (29)$$

O segundo termo a direita da igualdade é o que se esperaria caso  $\Gamma_I^{mn}$  fosse um tensor; o primeiro termo não-homogêneo é que destrói o seu caráter tensorial.

Um pouco de análise tensorial fornece uma relação simples entre  $\Gamma_I^{mn}$  e  $g^{rs}$ . De início, percebe-se que

$$\begin{aligned}\frac{\partial g'^{mn}}{\partial q'_k} &= \frac{\partial}{\partial q'_k} \left( g'^{rs} \frac{\partial q_r}{\partial q'_m} \frac{\partial q_s}{\partial q'_n} \right) \\ &= \frac{\partial g'^{rs}}{\partial q_t} \frac{\partial q_t}{\partial q'_k} \frac{\partial q_r}{\partial q'_m} \frac{\partial q_s}{\partial q'_n} + \\ &g'^{rs} \frac{\partial^2 q_r}{\partial q'_k \partial q'_m} \frac{\partial q_s}{\partial q'_n} + g'^{rs} \frac{\partial q_r}{\partial q'_m} \frac{\partial^2 q_s}{\partial q'_k \partial q'_n},\end{aligned}$$

portanto

$$\begin{aligned}\frac{\partial g'^{kn}}{\partial q'_m} + \frac{\partial g'^{mk}}{\partial q'_n} - \frac{\partial g'^{mn}}{\partial q'_k} = \\ \frac{\partial q_t}{\partial q'_k} \frac{\partial q_r}{\partial q'_m} \frac{\partial q_s}{\partial q'_n} \left( \frac{\partial g'^{ts}}{\partial q_r} + \frac{\partial g'^{rt}}{\partial q_s} - \frac{\partial g'^{rs}}{\partial q_t} \right) + 2 g'^{rs} \frac{\partial q_s}{\partial q'_k} \frac{\partial^2 q_r}{\partial q'_m \partial q'_n}.\end{aligned}$$

De onde segue que

$$\left\{ \begin{matrix} mn \\ 1 \end{matrix} \right\}' = \frac{\partial q'_1}{\partial q_r} \frac{\partial q_t}{\partial q'_m} \frac{\partial q_s}{\partial q'_n} \left\{ \begin{matrix} mn \\ 1 \end{matrix} \right\} + \frac{\partial q'_1}{\partial q_r} \frac{\partial^2 q_r}{\partial q'_m \partial q'_n},$$

onde

$$\left\{ \begin{matrix} mn \\ 1 \end{matrix} \right\} \equiv \frac{1}{2} g_{1k} \left( \frac{\partial g'^{kn}}{\partial q_m} + \frac{\partial g'^{km}}{\partial q_n} - \frac{\partial g'^{mn}}{\partial q_k} \right). \quad (30)$$

Subtraindo estas duas equações, nota-se que  $\Gamma_i^{mn}$  menos  $\left\{ \begin{matrix} mn \\ 1 \end{matrix} \right\}$  é um tensor:

$$\left( \Gamma_i^{mn} - \left\{ \begin{matrix} mn \\ 1 \end{matrix} \right\} \right)' = \frac{\partial q'_1}{\partial q_r} \frac{\partial q_t}{\partial q'_m} \frac{\partial q_s}{\partial q'_n} \left( \Gamma_r^{ts} - \left\{ \begin{matrix} ts \\ r \end{matrix} \right\} \right).$$

Como já foi dito, existe um sistema de coordenadas especial  $x^a(q)$  no qual, num dado ponto P, pode-se considerar qualquer curva como uma reta. Neste sistema  $\Gamma_i^{mn}$  é nulo, para que a equação (27) se reduza à equação linear. Também nesse sistema, como a métrica é igual à identidade, suas derivadas são nulas.

Como  $\Gamma_i^{mn} - \left\{ \begin{matrix} mn \\ 1 \end{matrix} \right\}$  se anula nesse referencial, e levando em consideração que a nulidade de um tensor é um invariante por transformação de coordenadas, então  $\Gamma_i^{mn} - \left\{ \begin{matrix} mn \\ 1 \end{matrix} \right\}$  será nulo em qualquer referencial, e assim

$$\Gamma_l^{mn} = \frac{1}{2} g_{lk} \left( \frac{\partial g^{kn}}{\partial q_m} + \frac{\partial g^{km}}{\partial q_n} - \frac{\partial g^{mn}}{\partial q_k} \right). \quad (31)$$

É útil ter à disposição uma fórmula alternativa para o termo não-homogêneo da conexão afim  $\Gamma_l^{mn}$ . Ao diferenciar a identidade

$$\frac{\partial q'_l}{\partial q_r} \frac{\partial q_r}{\partial q'_n} = \delta^n_l$$

com relação a  $q'^{m'}$  encontra-se de imediato que

$$\frac{\partial q'_l}{\partial q_r} \frac{\partial^2 q_r}{\partial q'_m \partial q'_n} = \frac{\partial q_r}{\partial q'_n} \frac{\partial q_s}{\partial q'_m} \frac{\partial^2 q'_l}{\partial q_s \partial q_r}.$$

Portanto pode-se escrever a equação (29) sob a forma

$$\Gamma_l'^{mn} = \frac{\partial q'_l}{\partial q_r} \frac{\partial q_s}{\partial q'_m} \frac{\partial q_t}{\partial q'_n} \Gamma_r^{ts} - \frac{\partial q_r}{\partial q'_n} \frac{\partial q_s}{\partial q'_m} \frac{\partial^2 q'_l}{\partial q_s \partial q_r}. \quad (32)$$

Prosseguindo mais afundo na busca pelo significado de  $\Gamma_l'^{mn}$ , de longe se avista que a derivada de um tensor não se comporta como um destes. Uma amostra pode ser obtida ao diferenciar um vetor contravariante  $U_r$ , cuja lei de transformação é

$$U'_m = \frac{\partial q'_m}{\partial q_r} U_r.$$

De tal procedimento surge

$$\frac{\partial U'_m}{\partial q'_n} = \frac{\partial q'_m}{\partial q_r} \frac{\partial q_s}{\partial q'_n} \frac{\partial U_m}{\partial q_s} + \frac{\partial q_s}{\partial q'_n} \frac{\partial^2 q'_m}{\partial q_s \partial q_r} U_r, \quad (33)$$

na qual se avulta o termo não-homogêneo que perverte mais um aspirante a tensor. Se a derivada  $\partial U'_m / \partial q'_n$  fosse um tensor, apenas o primeiro termo à direita da igualdade deveria existir.

Entretanto é possível encontra um meio de extrair *aurum ex estercore* ("ouro de esterco"). Combinando a equação (32) com o vetor contravariante  $U$  obtém-se:

$$\begin{aligned} \Gamma'^{mn} U'_n &= \left( \frac{\partial q'_1}{\partial q_r} \frac{\partial q_t}{\partial q'_m} \frac{\partial q_s}{\partial q'_n} \Gamma_r^{ts} - \frac{\partial^2 q'_1}{\partial q_s \partial q_r} \frac{\partial q_r}{\partial q'_m} \frac{\partial q_s}{\partial q'_n} \right) \frac{\partial q'_n}{\partial q_h} U_h \\ &= \frac{\partial q'_1}{\partial q_r} \frac{\partial q_t}{\partial q'_m} \Gamma_r^{ts} U_s - \frac{\partial^2 q'_1}{\partial q_s \partial q_r} \frac{\partial q_r}{\partial q'_m} U_s. \end{aligned} \quad (34)$$

Adicionando (33) com (34), consegue-se eliminar o termo abjeto, formando-se:

$$\frac{\partial U'_1}{\partial q'_m} + \Gamma'^{mn} U'_n = \frac{\partial q'_1}{\partial q_r} \frac{\partial q_t}{\partial q'_m} \left( \frac{\partial U_r}{\partial q_t} + \Gamma_r^{ts} U_s \right),$$

que conduz à definição da derivada covariante:

$$U'_{1; m} \equiv \frac{\partial U'_1}{\partial q'_m} + \Gamma'^{ms} U_s. \quad (35)$$

Trata-se de um objeto bem comportado, que obedece à risca os protocolos de transformação dos tensores:

$$U'_{1; m} = \frac{\partial q'_1}{\partial q_r} \frac{\partial q_t}{\partial q'_m} U_{r; t}.$$

Também é possível definir uma derivada covariante de um tensor covariante  $V^r$ .

Basta utilizar a forma (29) da transformação de  $\Gamma'^{mn}$  ao invés da forma (32). Por causa disso, há uma troca de sinais, e chega-se no resultado

$$V^{n;r} \equiv \frac{\partial V^n}{\partial q_r} - \Gamma_s^{nr} V^s,$$

que se tranforma da maneira esperada:

$$V'^{k;l} = \frac{\partial q_n}{\partial q'_k} \frac{\partial q_r}{\partial q'_l} V^{n;r}.$$

A derivada covariante, num referencial em que  $\Gamma_l^{mn}$  se anula localmente, reduz-se a derivada usual.

Quando o tensor  $T(s)$  é definido apenas ao longo de uma curva  $q_m(s)$ , não existe sentido em tomar a derivada covariante em relação a  $q_n$ , visto que ele não ocorre em todo o espaço. Porém consegue-se definir a derivada covariante sobre a curva com relação ao invariante  $s$  que parametriza-a.

Considerando primeiramente um vetor contravariante  $A_n(s)$ , cuja regra de transformação é:

$$A'_m(s) = \frac{\partial q'_m}{\partial q_n} A_n(s). \quad (36)$$

Deve-se atentar para que a derivada parcial  $\partial q'_m / \partial q_n$  seja resolvida sobre a curva  $q_m(s)$ . Por causa disso, ela torna-se dependente de  $s$ . Conseqüentemente ao diferenciar com relação a  $s$  encontra-se dois termos:

$$\frac{\partial A'_m}{\partial s} = \frac{\partial q'_m}{\partial q_n} \frac{\partial A_n}{\partial s} + \frac{\partial^2 q'_m}{\partial q_n \partial q_l} \frac{\partial q_l}{\partial s} A_n(s). \quad (37)$$

A derivada mista que aqui se insinua, é a mesma que ocorre na transformação de  $\Gamma_l^{mn}$ . Isso sugere a definição da derivada covariante ao longo da curva  $q_m(s)$ :

$$\frac{DA_m}{ds} \equiv \frac{dA_m}{ds} + \Gamma_m^{nl} \frac{dq_l}{ds} A_n. \quad (38)$$

As equações (32), (36) e (37) mostram que esse objeto é um vetor:

$$\frac{DA'_m}{ds} = \frac{\partial q'_m}{\partial q_n} \frac{DA_n}{ds}. \quad (39)$$

As mesmas considerações conduzem à definição da derivada covariante de um vetor covariante  $B^n(s)$  ao longo de uma curva  $q_m(s)$ :

$$\frac{D B^m}{ds} \equiv \frac{dB^m}{ds} - \Gamma_n^{m1} \frac{dq_1}{ds} B^n . \quad (40)$$

Do mesmo modo, a derivada covariante de um tensor geral  $T(s)$  ao longo de uma curva  $q_m(s)$  é definido pela adição a  $dT/ds$  de termos tais como os de (38) para os índices inferiores, e pela subtração de termos como os de (40) para os índices superiores. Por exemplo:

$$\frac{D T^n_m}{ds} \equiv \frac{dT^n_m}{ds} + \Gamma_m^{r1} \frac{dq_1}{ds} T^n_r - \Gamma_r^{n1} \frac{dq_1}{ds} T^r_m ,$$

que segue a regra de transformação de tensores.

$$\frac{D T'^n_m}{ds} = \frac{\partial q'_m}{\partial q_r} \frac{\partial q_m}{\partial q'_n} \frac{D T^s_r}{ds} .$$

Supondo o caso em que um vetor, percorrendo uma curva em  $q_m(s)$ , seja constante ao longo de  $s$  se visto do referencial plano local  $x_a(q)$ . Isso ocorre, por exemplo, com o vetor tangente à curva. Nesse referencial em particular a conexão afim, assim como a derivada  $dA_m/ds$ , se anula, de forma que:

$$\frac{DA_m}{ds} = 0 .$$

Como já foi dito, a nulidade de um tensor é um invariante por transformações de coordenadas, de modo que essa quantidade continuará sendo zero em qualquer outro referencial mais geral. Assim, descobre-se que o vetor  $A_n(s)$  é sujeito à equação diferencial de primeira ordem

$$\frac{dA_m}{ds} = -\Gamma_m^{n1} \frac{dq_1}{ds} A_n ,$$

que define  $A_n$  para todo  $s$ , dado  $A_n(0)$ . Diz-se que um vetor  $A_n(s)$  assim definido ao longo de uma curva  $q_m(s)$  foi definido por transporte paralelo.

Agora torna-se patente o significado da conexão afim. Ela conecta os elementos no espaço afim, transmitindo a cada um deles, em cada ponto, os efeitos da curvatura do espaço. De modo que para se comparar a variação de um objeto matemático ao longo do espaço deve-se descontar as alterações geradas pela curvatura do espaço. Essa é a função da conexão afim na derivada covariante.

### 3.11 TENSOR CURVATURA

Embora a conexão afim seja suficiente para caracterizar a curvatura do espaço, seu uso é desvantajoso, por causa do fato dela não ser um tensor. Isto é, sua regra de transformação numa mudança de coordenadas não é homogênea.

Para evitar essa inconveniência, pode-se utilizar um tensor definido a partir do símbolo de Christoffel. Tal tensor é uma função da métrica e de suas derivadas primeiras e segundas. De fato, se fosse pretendido um tensor em função apenas da métrica e suas derivadas primeiras o resultado, em um sistema plano local de coordenadas, dependeria unicamente da métrica, e, em se tratando de uma igualdade entre tensores, ela seria válida em qualquer sistema de coordenadas.

Para calcular o tensor que descreve a curvatura pode-se recorrer à transformação da conexão afim. Assim como já foi feito, ao eliminar dela o termo inhomogêneo, encontrase um tensor. Como já foi mostrado, a conexão afim transforma-se de acordo com a regra:

$$\Gamma_1^{mn} = \frac{\partial q_l}{\partial q'_t} \frac{\partial q'_r}{\partial q_m} \frac{\partial q'_s}{\partial q_n} \Gamma'_t{}^{rs} + \frac{\partial q_l}{\partial q'_t} \frac{\partial^2 q'_t}{\partial q_m \partial q_n};$$

para eliminar o termo inhomogêneo é preciso isolá-lo:

$$\frac{\partial^2 q'_t}{\partial q_m \partial q_n} = \frac{\partial q'_t}{\partial q_l} \Gamma_1^{mn} - \frac{\partial q'_r}{\partial q_m} \frac{\partial q'_s}{\partial q_n} \Gamma'_t{}^{rs}. \quad (41)$$

Uma maneira de se livrar do lado esquerdo desta equação é utilizar a propriedade da comutatividade das derivadas parciais. Derivar em relação a  $q_k$  resulta em:

$$\begin{aligned} \frac{\partial^3 q'_t}{\partial q_k \partial q_m \partial q_n} &= \frac{\partial^2 q'_t}{\partial q_k \partial q_l} \Gamma_l^{mn} + \frac{\partial q'_t}{\partial q_l} \frac{\partial \Gamma_l^{mn}}{\partial q_k} - \frac{\partial^2 q'_r}{\partial q_k \partial q_m} \frac{\partial q'_s}{\partial q_n} \Gamma'_t{}^{rs} - \\ &\quad \frac{\partial q'_r}{\partial q_m} \frac{\partial^2 q'_s}{\partial q_k \partial q_n} \Gamma'_t{}^{rs} - \frac{\partial q'_r}{\partial q_n} \frac{\partial q'_s}{\partial q_n} \frac{\partial q'_h}{\partial q_k} \frac{\partial \Gamma'_t{}^{rs}}{\partial q'_h}, \end{aligned}$$

de acordo com a equação (41), pode-se substituir as derivadas mistas do lado direito da igualdade:

$$\begin{aligned} \frac{\partial^3 q'_t}{\partial q_k \partial q_m \partial q_n} &= \Gamma_l^{mn} \left( \frac{\partial q'_t}{\partial q_h} \Gamma_h^{kl} - \frac{\partial q'_r}{\partial q_k} \frac{\partial q'_s}{\partial q_l} \Gamma'_t{}^{rs} \right) \\ &\quad - \Gamma'_t{}^{rs} \frac{\partial q'_s}{\partial q_n} \left( \frac{\partial q'_r}{\partial q_h} \Gamma_h^{mk} - \frac{\partial q'_h}{\partial q_m} \frac{\partial q'_r}{\partial q_k} \Gamma'_s{}^{rh} \right) \\ &\quad - \Gamma'_t{}^{rs} \frac{\partial q'_r}{\partial q_n} \left( \frac{\partial q'_s}{\partial q_h} \Gamma_h^{kn} - \frac{\partial q'_r}{\partial q_k} \frac{\partial q'_h}{\partial q_n} \Gamma'_s{}^{rh} \right) \\ &\quad + \frac{\partial q'_t}{\partial q_l} \frac{\partial \Gamma_l^{mn}}{\partial q_k} - \frac{\partial q'_r}{\partial q_m} \frac{\partial q'_s}{\partial q_n} \frac{\partial q'_h}{\partial q_k} \frac{\partial \Gamma'_t{}^{rs}}{\partial q'_h}. \end{aligned}$$

Se os termos similares forem agrupados, e os índices mudos renomeados, tal equação pode ser reescrita como se segue:

$$\begin{aligned} \frac{\partial^3 q'_t}{\partial q_k \partial q_m \partial q_n} &= \frac{\partial q'_t}{\partial q_l} \left( \frac{\partial \Gamma_l^{mn}}{\partial q_k} + \Gamma_h^{mn} \Gamma_l^{hk} \right) \\ &\quad - \frac{\partial q'_r}{\partial q_m} \frac{\partial q'_s}{\partial q_n} \\ &\quad \frac{\partial q'_h}{\partial q_k} \left( \frac{\partial \Gamma'_t{}^{rs}}{\partial q'_h} - \Gamma'_t{}^{r1} \Gamma'_1{}^{hs} - \Gamma'_t{}^{1s} \Gamma'_1{}^{hr} \right) \\ &\quad - \Gamma'_t{}^{rs} \frac{\partial q'_s}{\partial q_l} \left( \Gamma_l^{mn} \frac{\partial q'_r}{\partial q_k} + \Gamma_l^{nk} \frac{\partial q'_r}{\partial q_m} + \Gamma_l^{mk} \frac{\partial q'_r}{\partial q_n} \right). \end{aligned} \tag{42}$$

Ao subtrair a mesma equação com  $m$  e  $n$  trocados, encontra-se que todos termos que contém produtos de  $\Gamma$  com  $\Gamma'$  se anulam, restando:

$$\begin{aligned}
0 &= \frac{\partial^3 q'_t}{\partial q_k \partial q_m \partial q_n} - \frac{\partial^3 q'_t}{\partial q_k \partial q_n \partial q_m} \\
&= \frac{\partial q'_t}{\partial q_l} \left( \frac{\partial \Gamma_l^{mn}}{\partial q_k} - \frac{\partial \Gamma_l^{mk}}{\partial q_n} + \Gamma_h^{mn} \Gamma_l^{hk} - \Gamma_h^{mk} \Gamma_l^{hn} \right) \\
&\quad - \frac{\partial q'_r}{\partial q_m} \frac{\partial q'_s}{\partial q_n} \frac{\partial q'_h}{\partial q_k} \\
&\quad \left( \frac{\partial \Gamma_t^{rs}}{\partial q'_h} - \frac{\partial \Gamma_t^{rh}}{\partial q'_s} - \Gamma_t^{ls} \Gamma_l^{hr} + \Gamma_t^{lh} \Gamma_l^{sr} \right).
\end{aligned}$$

Este resultado pode ser reescrito como uma regra de transformação:

$$R'_t{}^{rsh} = \frac{\partial q'_t}{\partial q_l} \frac{\partial q_m}{\partial q'_r} \frac{\partial q_n}{\partial q'_s} \frac{\partial q_k}{\partial q'_h} R_l{}^{mnk}; \quad (43)$$

através da qual define-se o tensor curvatura de Riemann-Christoffel:

$$R_l{}^{mnk} \equiv \frac{\partial q'_t}{\partial q_l} \left( \frac{\partial \Gamma_l^{mn}}{\partial q_k} - \frac{\partial \Gamma_l^{mk}}{\partial q_n} + \Gamma_h^{mn} \Gamma_l^{hk} - \Gamma_h^{mk} \Gamma_l^{hn} \right). \quad (44)$$

Este tensor pode ser escrito numa forma completamente covariante com o auxílio do tensor métrico:

$$R^{lmnk} = g^{ls} R_s{}^{mnk}.$$

Como a conexão afim é dependente da métrica, também é possível representar o tensor curvatura como função da métrica:

$$\begin{aligned}
R^{lmnk} &= \frac{1}{2} \left( \frac{\partial^2 g^{ln}}{\partial q_k \partial q_m} - \frac{\partial^2 g^{mn}}{\partial q_k \partial q_l} - \frac{\partial^2 g^{lk}}{\partial q_n \partial q_m} + \frac{\partial^2 g^{mn}}{\partial q_k \partial q_l} \right) + \\
&\quad g^{hs} (\Gamma_h^{nl} \Gamma_s{}^{mk} - \Gamma_h^{kl} \Gamma_s{}^{mn}).
\end{aligned} \quad (45)$$

O tensor curvatura possui tanto a propriedade de simetria:

$$R_{lmnk} = R_{nkml}, \quad (46)$$

quanto a de anti-simetria:

$$R_{lmnk} = -R_{mlnk} = R_{lkmn} = +R_{mknl}. \quad (47)$$

Além disso, ele é cíclico:

$$R_{1mmk} + R_{1kmm} + R_{1mkm} = 0. \quad (48)$$

Regressando ao tema do transporte paralelo ao longo de uma curva, poder-se-ia questionar sobre os efeitos que a curvatura do espaço inflige a um tensor que caminha ao longo de um circuito de acordo com a expressão do transporte paralelo

$$\frac{\partial S^m}{\partial s} = \Gamma_1^{mn} \frac{dx_n}{ds} S^1. \quad (49)$$

Esta questão pode ser respondida aplicando-se o mesmo método empregado para provar o teorema de Stoke's: dividir a superfície  $A$ , cujas bordas são definidas pela curva fechada  $C$ , em células limitadas por pequenos circuitos  $C_N$ . A mudança ocorrida em  $S_m$  quando ele é transportado paralelamente em volta de  $C$  pode ser escrita como a soma das alterações em  $S_m$  quando levado ao redor de cada uma daqueles pequenos circuitos:

$$\Delta S^m = \sum_N \Delta_N S^m. \quad (50)$$

Como a variação de  $S_m$  em torno de qualquer célula interna é cancelada pelas mudanças nas células adjacentes, sobram apenas as contribuições dos perímetros das células externas que compoem  $C$ . Conseqüentemente a questão inicial se reduz a saber se ocorrem mudanças em  $S_m$  quando transportado paralelamente ao redor de um pequena curva fechada. Se esta é suficientemente pequena, pode-se expandir  $\Gamma_1^{mn}(x)$  em torno de algum ponto  $X \equiv x(s_0)$  na curva:

$$\Gamma_1^{mn}(x) = \Gamma_1^{mn}(X) + (x_r - X_r) \frac{\partial}{\partial X_r} \Gamma_1^{mn}(X) + \dots \quad (51)$$

Também  $S_m$  pode ser expandido em torno desse ponto, resultando, até primeira ordem, em:

$$S^m(s) = S^m(s_0) + (s - s_0) \frac{dS^m}{ds_0} + \dots \quad (52)$$

Ou, pela equação (49):

$$S^m(s) = S^m(s_0) + \Gamma_I^{mn}(X) (x_r(s) - X_r) S^m(s_0) + \dots \quad (53)$$

Ao utilizar as equações (51) e (53) em (49) obtém-se uma equação válida até segunda ordem:

$$S^m(s) \approx S^m(s_0) + \int_{s_0}^s \left[ \Gamma_I^{mn}(X) + (x_r - X_r) \frac{\partial}{\partial X_r} \Gamma_I^{mn}(X) + \dots \right] \\ \times [S^l(s_0) + \Gamma_s^{lr}(X) (x_r(s) - X_r) S^s(s_0) + \dots] \frac{dx_n(s)}{ds} ds;$$

ou, descartando termos de terceira ordem e além em  $x - X$ :

$$S^m(s) \approx S^m(s_0) + \Gamma_I^{mn}(X) S^l(s_0) \int_{s_0}^s \frac{dx_n(s)}{ds} ds + \left\{ \frac{\partial}{\partial X_r} \Gamma_I^{mn}(X) + \right. \\ \left. \Gamma_s^{lr}(X) \Gamma_I^{mn}(X) \right\} S^s(s_0) \int_{s_0}^s (x_r - X_r) \frac{dx_n(s)}{ds} ds.$$

Se  $x_m(s)$  retorna ao seu valor original em  $X_m$  em algum ponto  $s = s_1$ , então segue que:

$$\int_{s_0}^{s_1} \frac{dx_n(s)}{ds} ds = 0,$$

de modo que a variação de  $S^m$  devido ao transporte paralelo ao redor de pequeno circuito  $x_m(s)$  é de segunda ordem:

$$\begin{aligned}
\Delta S^m &\equiv S^m(s_1) - S^m(s_0) \\
&= \left\{ \frac{\partial}{\partial X_r} \Gamma_1^{mn}(X) + \right. \\
&\quad \left. \Gamma_s^{1r}(X) \Gamma_1^{mn}(X) \right\} S^s(s_0) \int_{s_0}^{s_1} x_r dx_n,
\end{aligned} \tag{54}$$

onde

$$\int_{s_0}^{s_1} x_r dx_n = \int_{s_0}^{s_1} x_r \frac{dx_n(s)}{ds} ds.$$

Esta integral não tem o hábito de se anular; por exemplo, se a curva em questão em um pequeno paralelogramo com bordas  $\delta a_r, \delta b_r$ , ela vale:

$$\oint x_r dx_n = \delta a_r \delta b_n - \delta a_n \delta b_r.$$

No entanto, ela é sempre anti-simétrica em  $r$  e  $n$ , como pode ser observado pela integração parcial:

$$\oint x_r dx_n = \int_{s_0}^{s_1} \frac{d}{ds} (x_r x_n) ds - \int_{s_0}^{s_1} s_n \frac{dx_r}{ds} ds = -\oint x_n dx_r.$$

Portanto o coeficiente desta integral em (54) pode ser reposto pela sua parte anti-simétrica, que é justamente o tensor curvatura (44), de forma que:

$$\Delta S^m = \frac{1}{2} R_s^{mnr} S^s \oint x_r dx_n. \tag{55}$$

Daqui pode-se concluir que um vetor arbitrário  $S^m$  não se altera quando é paralelamente transportado ao redor de uma pequena curva fechada arbitrária em  $X$ . E mais além, se o tensor curvatura  $R_s^{mnr}$  é nulo sobre a superfície  $A$ , então um vetor arbitrário  $S^m$  não se altera quando é paralelamente transportado ao longo da curva fechada  $C$  que percorre o perímetro da superfície  $A$ .

Se de fato o tensor curvatura for nulo, então um vetor  $S_m$  sofre a mesma variação quando transportado paralelamente ao longo de dois caminhos distintos, mas com extremidades coincidentes:

Sejam dois segmentos A e B que conectam os pontos  $x_n$  e  $X_m$ . A variação do vetor  $S_m$  ao ser carregado paralelamente de  $x$  para  $X$  ao longo de A deve ser cancelada pela alteração em  $S_m$  quando for paralelamente transportado por B de  $X$  até  $x$ , isto é:

$$\Delta_{X \rightarrow x}^A S^m + \Delta_{x \rightarrow X}^B S^m = 0.$$

Entretanto, a mudança em  $S^m$  por causa do transporte paralelo de  $x$  até  $X$  através do segmento B é inversa àquela quando o vetor segue de  $X$  para  $x$  via B:

$$\Delta_{x \rightarrow X}^B S^m = -\Delta_{X \rightarrow x}^A S^m,$$

e assim

$$\Delta_{X \rightarrow x}^A S^m = -\Delta_{x \rightarrow X}^B S^m.$$

Isto é, o mesmo valor é obtido para  $S_m$  por transporte paralelo de  $X$  até  $x$ , independentemente de qual caminho é percorrido. Pode-se mostrar[44] que o número de elementos do tensor de curvatura  $R_s^{mnr}$  que são algebricamente independentes, num espaço com  $d$  dimensões é igual a

$$C_d = \frac{1}{12} d^2 (d^2 - 1). \quad (56)$$

Em duas dimensões, têm-se apenas uma componente independente, que pode ser a  $R^{1212}$ ; as outras são relacionadas a ela pela equação (47):

$$\begin{aligned} R^{1212} &= -R^{2112} = -R^{1221} = R^{2121} \\ R^{1111} &= R^{1122} = R^{2211} = R^{2222} = 0. \end{aligned}$$

Estas igualdades podem ser resumidas num formato mais elegante:

$$R^{lmnk} = (g^{ln} g^{mk} - g^{lk} g^{mn}) \frac{R^{1212}}{g},$$

onde  $g$  é o determinante  $g = g^{11} g^{22} - (g^{12})^2$  do tensor métrico. Contraindo  $l$  com  $n$  resulta no tensor de Ricci

$$R^{mk} = g^{mk} \frac{R^{1212}}{g},$$

e a contração de  $m$  com  $k$  gera a curvatura escalar

$$R = 2 \frac{R^{1212}}{g},$$

de modo que o tensor curvatura pode ser escrito como

$$R^{lmnk} = \frac{1}{2} R (g^{ln} g^{mk} - g^{lk} g^{mn}).$$

A curvatura de Gauss  $K$ , discutida na seção 3.9, é definida por

$$K = -\frac{R}{2} = -\frac{R^{1212}}{g}.$$

Realizando esta expressão por meio das equações (45) e (31), e considerando um sistema de coordenadas ortogonal ( $g^{12} = 0$ ), chega-se a:

$$K = -\frac{1}{2g} \left( \frac{\partial^2 g^{11}}{\partial q_2^2} + \frac{\partial^2 g^{22}}{\partial q_1^2} \right) + \frac{g^{22}}{4g^2} \left( \frac{\partial g^{11}}{\partial q_1} \frac{\partial g^{22}}{\partial q_1} + \left( \frac{\partial g^{11}}{\partial q_1} \right)^2 \right) + \frac{g^{11}}{4g^2} \left( \frac{\partial g^{11}}{\partial q_2} \frac{\partial g^{22}}{\partial q_2} + \left( \frac{\partial g^{22}}{\partial q_1} \right)^2 \right),$$

que é exatamente a equação (26)

Em três dimensões, a equação (56) mostra que o tensor curvatura  $R_s^{mnr}$  possui apenas  $C_3 = 6$  componentes independentes. Este também é o número de componentes independentes do tensor de Ricci em três dimensões.

Este tensor é formado pela contração de índices anti-simétricos do tensor curvatura de Riemann-Christoffel:

$$R^{mk} = g^{ln} R^{lmnk}. \quad (57)$$

Em conseqüência dessa semelhança,  $R^{lmnk}$  pode ser expresso em termos de  $R^{mk}$  apenas:

$$R^{lmnk} = g^{ln} R^{mk} - g^{lk} R^{mn} - g^{mn} R^{lk} + g^{mk} R^{ln} - \frac{1}{2} (g^{ln} g^{mk} - g^{lk} g^{mn}) R.$$

Onde

$$R = g_{mk} R^{mk}. \quad (58)$$

Por causa dessa possibilidade, a curvatura, em três dimensões pode ser completamente descrita pelo tensor de Ricci  $R^{mk}$ .

Embora as  $\frac{1}{12} d^2(d^2 - 1)$  componentes de  $R^{lmnk}$  descrevam a curvatura de um espaço d-dimensional, elas não o fazem de maneira invariante, visto que os valores destas componentes dependem não apenas das propriedades intrínsecas do espaço mas também do sistema de coordenadas em particular escolhido. Como foi visto para o caso bidimensional mais acima, para se caracterizar um espaço curvo de modo invariante, deve-se fazê-lo em termos de escalares contruídos a partir do tensores curvatura  $R^{lmnk}$  e métrico  $g_{mn}$ . O número de escalares que podem ser construídos a partir destes dois tensores é:

$$I_d = \frac{1}{12} d (d - 1) (d - 2) (d + 3).$$

O caso bidimensional é uma exceção a essa expressão. Para três dimensões, essa equação revela que existem três escalares para descrever a curvatura., que podem ser escolhidos como as raízes da equação secular

$$\det | R^{mn} - \lambda g^{mn} | = 0, \quad (59)$$

ou ainda, de modo equivalente, as três quantidades que aparecem como coeficientes na equação (59):

$$R, \quad R_{mn} R^{mn} \quad e \quad \frac{\det | R^{mn} |}{\det | g^{mn} |} . \quad (60)$$

## **CAPÍTULO 4**

### **ALTERANDO AS MEDIDAS**

O modelo mais largamente utilizado para descrever o comportamento dos cristais líquidos é aquele que assume que o fluido é composto de moléculas com formato elipsoidal. Emprega-se a palavra "formato" num sentido mais amplo que o puramente espacial, com fronteiras bem delimitadas, visto que as moléculas não têm uma superfície de contato definida. Por isso a palavra "formato" deve ser entendida no sentido de "superfície de interação", isto é, numa conotação que transmita a idéia de como uma molécula percebe e reage às outras.

Partindo dos modelos mais simples, e dirigindo-se até o mais elaborados, a cada passo dado se agrega mais e mais elementos à relação que descreve as superfícies dos potenciais de interação. O modelo mais simples considera apenas a distância entre os centro de massa das moléculas, ou seja, é o modelo dos gases ideais. Um nível de sofisticação mais alto é galgado ao levar em conta o formato elipsoidal das moléculas e o alinhamento relativo entre elas. Quanto mais elaborado, maior o grau de complexidade, e tanto mais árduo encontrar uma solução analítica ou mesmo numérica. E em geral tanto trabalho não é recompensado pelos resultados encontrados que diferem bastante dos dados experimentais.

A mudança de métrica mostra-se-á uma ferramenta poderosa, uma vez que obtém resultados em ótima concordância com os dados experimentais, além de tratar-se de um instrumento bem simples.

Para encontrar a função métrica adequada ao objetivo proposto convém primeiramente recordar que a anisotropia dos cristais líquidos, observada na escala macroscópica tem sua origem na anisotropia das moléculas que constituem o fluido. De fato, quando se analisa os agrupamentos formados pelas moléculas, elas podem se combinar de modo a cancelar mutuamente a anisotropia dos indivíduos, isso ocorre devido ao caráter aleatório da distribuição e

alinhamento dessas moléculas dentro do fluido. Em situações especiais, as moléculas se alinham em grandes grupos locais que herdaram a anisotropia de seus constituintes. Nesses casos a anisotropia é percebida macroscopicamente.

Analogamente ao que é feito em Cosmologia, pela Teoria da Relatividade Geral, em que os efeitos da gravitação podem ser entendidos e descritos a partir da função métrica do espaço em consideração, na Física da Matéria Condensada pode-se trabalhar com a hipótese de que a anisotropia tem relação direta com a curvatura do espaço

Assumindo que a interação dos aglomerados dependa apenas da distância, pode-se levantar a questão sobre a existência de um espaço curvo que imprima nesse modelo todas, ou pelo menos algumas propriedades dos cristais líquidos que existem por causa da anisotropia.

O princípio da equivalência da Teoria da Relatividade Geral encontra um análogo na geometria em uma afirmação de Gauss, feita na época em que ele buscava provar a dispensabilidade do quinto axioma da geometria Euclidiana. Trata-se da alegação de que todas as propriedades de um espaço podem ser descritas em termos da métrica  $g_{ij}$  definida pelas derivadas  $\frac{dx_k}{dq_j}$  da função  $x(q)$  que define a transformação  $x \rightarrow q$  do sistema de coordenadas curvo global  $q$  para um sistema coordenadas plano local  $x$ :

$$g^{ij} = \frac{dx_k}{dq_i} \frac{dx_m}{dq_j} \delta^{km}. \quad (61)$$

A métrica desse espaço curvo deve ter uma forma tal que no sistema plano de coordenadas local os domínios elípsoidais

$$E^{ij} q_i q_j = 1 \quad (62)$$

assumam o formato esférico

$$S^{ij} x_i x_j = 1, \quad (63)$$

onde

$$S^{ij} = \delta^{ij}$$

para uma esfera de raio unitário.

Operando a transformação de coordenadas  $x \rightarrow q$  em (63), e comparando-a com (62) obtém-se que:

$$g^{ij} \frac{dx_i}{dq_k} \frac{dx_j}{dq_m} q_k q_m = E^{km} q_k q_m, \quad (64)$$

de onde segue que:

$$g^{ij} \frac{dx_i}{dq_k} \frac{dx_j}{dq_m} = E^{km}. \quad (65)$$

Comparando a equação (65) com a definição (61) da métrica, pode-se tomar a equação característica do elipsóide como a métrica do espaço curvo equivalente.

Num sistema de coordenadas com eixos coincidentes aos do elipsóide, a forma dessa matriz característica é:

$$E^d = \begin{vmatrix} \frac{1}{a^2} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{b^2} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{c^2} \end{vmatrix}. \quad (66)$$

No caso de se tratar de um elipsóide prolato  $b = c < a$ , se for oblato então  $b = c > a$ . As direções dos eixos principais são dadas pelos três versores ortonormais  $\{e_1, e_2, e_3\}$ , onde:

$$e_1 = (1, 0, 0); \quad e_2 = (0, 1, 0); \quad e_3 = (0, 0, 1). \quad (67)$$

A matriz diagonal (66) é completamente caracterizada pelos seus auto-vetores (67) e pelos seus auto-valores:

$$\left\{ \frac{1}{a^2}, \frac{1}{b^2}, \frac{1}{b^2} \right\}.$$

A partir deste ponto assume-se que  $b = c$ , ou seja, o eixo definido por  $e_1$  é o eixo de simetria do elipsóide.

Este mesmo elipsóide uniaxial num outro sistema de coordenadas será descrito pela matriz  $E^{ij}$ , obtida de (66) por uma rotação do elipsóide, indo da base  $\{c_1, c_2, c_3\}$  até um novo conjunto de auto-vetores  $\{p, q, r\}$ . Após essa operação, a matriz  $E^{ij}$ , assume a forma:

$$E^{ij} = \frac{1}{a^2} p^i p^j + \frac{1}{b^2} q^i q^j + \frac{1}{b^2} r^i r^j . \quad (68)$$

Isto pode ser demonstrado pela contração de  $E^{ij}$ , com cada um dos auto-vetores  $\{p, q, r\}$ :

$$E^{ij} p_j = \frac{1}{a^2} p^i; \quad E^{ij} q_j = \frac{1}{b^2} q^i; \quad E^{ij} r_j = \frac{1}{b^2} r^i,$$

onde foram utilizadas as propriedades de ortonormalidade dos auto-vetores  $\{p, q, r\}$ , e de onde decorre que  $\left\{ \frac{1}{a^2}, \frac{1}{b^2}, \frac{1}{b^2} \right\}$  são os auto-valores de (68). Como uma matriz é completamente caracterizada por seus auto-vetores e auto-valores, então (68) é de fato a versão rotacionada de (66).

Uma propriedade fundamental que decorre da ortonormalidade da base é a relação de completudeza:

$$p_i p_j + q_i q_j + r_i r_j = \delta_{ij} . \quad (69)$$

Utilizando esta equação com a (68) obtém-se:

$$\begin{aligned} E^{ij} &= \frac{1}{a^2} p^i p^j + \frac{1}{b^2} (\delta^{ij} - p^i p^j) \\ &= \frac{1}{1-e} \{ \delta^{ij} - e p^i p^j \}, \end{aligned} \quad (70)$$

onde

$$e = 1 - b^2$$

é a excentricidade e  $p$  corresponde ao eixo de simetria do elipsóide uniaxial. O valor do semi-eixo  $a$  foi fixado em  $a = 1$  para fins comparativos com a esfera unitária de raio  $r = 1$ . A excentricidade  $e$  fornece a magnitude da alongação elipsoidal; diferentes excentricidades correspondem a distintas formas

moleculares; quando  $e < 0$ ,  $b > 1$ , o que corresponde à fase discótica e, quando  $e > 0$ ,  $b < 1$ , corresponde à fase calamítica.

No limite em que a excentricidade  $e$  vai a zero, o elipsóide  $E^{ij}$  reduz-se a uma esfera de raio  $r = 1$ . Em consequência disso, a anisotropia do material pode ser quantificada ao medir-se quanto o elipsóide difere da sua esfera equivalente. Esta é formada a partir do elipsóide quando os semi-eixos desta tornam-se iguais. Uma relação plausível para  $r$  que satisfaça esta definição é:

$$\frac{1}{r^2} = \frac{1}{3} \text{Tr} (\mathbf{E}) = \frac{1}{1-e} \left(1 - \frac{e}{3}\right). \quad (71)$$

De acordo com ela, o quadrado do inverso do raio da esfera é dado pela média do inverso do quadrado dos semi-eixos do elipsóide. Assim, dada a matriz  $E^{ij}$  característica de um elipsóide, a matriz característica da esfera equivalente será:

$$S^{ij} = \delta^{ij} \frac{\text{Tr} (\mathbf{E})}{3},$$

e conseqüentemente a diferença entre os dois é:

$$\Delta E^{ij} = E^{ij} - S^{ij} = E^{ij} - \frac{1}{3} \delta^{ij} \text{Tr} (\mathbf{E}),$$

que pelo uso das equações (70) e (71) torna-se:

$$\Delta E^{ij} = \frac{e}{1-e} \left\{ \frac{1}{3} \delta^{ij} - p^i p^j \right\}.$$

Ou seja, a deformação  $\Delta E$  do elipsóide é determinada pelo produto de dois termos distintos, o escalar  $e/(1-e)$ , e o tensor

$$Q_E^{ij} = \frac{1}{3} \delta^{ij} - p^i p^j.$$

Este tensor é a componente anisotrópica da deformação do elipsóide. Ele coincide com o tensor momento de quadrupolo[45] e tem o formato

similar à expressão do tensor parâmetro de ordem de um cristal líquido nemático. De fato, segundo de Gennes[35], o tensor parâmetro de ordem pode ser medido pela diferença entre as partes anisotrópica e isotrópica de uma dada propriedade física.

A matriz do elipsóide (71) agora pode ser reescrita como:

$$\begin{aligned} E^{ij} &= S^{ij} + \frac{e}{b^2} Q_E^{ij} \\ &= \frac{1}{1-e} \left\{ \left(1 - \frac{1}{e}\right) \delta^{ij} + e Q_E^{ij} \right\}, \end{aligned} \quad (72)$$

onde o primeiro termo corresponde à parte isotrópica de  $E^{ij}$  e o segundo descreve seu desvio do formato esférico. Neste termo,  $e$  fornece a magnitude do desvio, ao passo que  $Q_E^{ij}$  dá a direção desse desvio.

De acordo com a definição dada por Hess[23-27], o método da conexão afim pode ser realizado pela deformação de um potencial de interação esférico até o ponto em que ele assume a forma elipsoidal dos domínios nemáticos. Desta consideração e da comparação entre as equações (61) e (65) segue que uma forma adequada para a métrica pode ser obtida da equação (72), de modo que ela consista de uma parte isotrópica, proporcional a  $\delta^{ij}$  e outra parte anisotrópica, proporcional a  $Q^{ij}$ .

Antes de proceder com o cálculo da métrica  $g^{ij}$ , é importante esclarecer alguns pontos acerca do tensor  $Q_E^{ij}$ . Embora ele e o tensor parâmetro de ordem tenham uma forma idêntica, esta igualdade fica restrita ao âmbito matemático, pois conceitualmente eles descrevem objetos diferentes, sendo este o motivo da introdução do índice E em  $Q_E^{ij}$ .

No entanto, esta igualdade de forma pode ser dilatada a ponto de abranger ambos os conceitos. Uma consequência crucial da equiparação destes dois objetos é tornar a métrica dependente da temperatura; este resultado constitui a essência que causou o emprego do método de Hess; e sua motivação física pode ser prontamente compreendida: para temperaturas  $T$  maiores que o ponto de transição de fase nemático-isotrópica, o cristal líquido é isotrópico e

nenhuma direção é privilegiada; para temperaturas  $T$  menores que o ponto de transição de fase, o líquido se torna anisotrópico e, em cada ponto muitas propriedades físicas adquirem preferência por uma direção. Essa quebra de simetria, já abordada anteriormente, conduz à definição dos parâmetros de ordem microscópico e macroscópico, visto que a anisotropia é observada nestes dois níveis de escala; em medidas termodinâmicas ela aparece macroscopicamente, no entanto sua origem é microscópica: as moléculas/miscelas do cristal líquido têm uma anisotropia microscópica intrínseca que, quando observadas em conjunto se combinam de forma que podem, ou não, ser observadas em medidas macroscópicas, o resultado depende da temperatura. É recomendável fazer uma distinção entre a natureza macroscópica e a microscópica de  $Q^{ij}$  colocando-se um acento circunflexo sobre seu parâmetro vetorial  $\hat{n}$  quando este denota um versor microscópico. Portanto  $Q^{ij}(\hat{n})$  significa que  $\hat{n}$  é uma variável microscópica aleatória e o parâmetro de ordem associado é um parâmetro microscópico. Da mesma forma, sem o circunflexo em  $\hat{n}$ ,  $Q^{ij}(n)$  denota que  $n$  é uma variável macroscópica, chamada *diretor*, e o parâmetro de ordem correspondente é um parâmetro macroscópico. O sentido que o diretor aponta não é importante, apenas módulo e direção têm sentido físico, visto que as miscelas são simétricas em relação ao plano formado pelos eixos menores do elipsóide. A conexão entre estas duas quantidades é feita ao assumir que variável aleatória microscópica  $\hat{n}$  oscila tão freneticamente que quando se toma a média de  $Q^{ij}(\hat{n})$ , no tempo e/ou na vizinhança de um ponto, ela determina um parâmetro de ordem macroscópico  $Q^{ij}(n)$ , a partir do qual a anisotropia macroscópica uniaxial pode ser medida. Em termos matemáticos[35]:

$$\langle Q^{ij}(\hat{n}) \rangle = S Q^{ij}(n), \quad (73)$$

onde  $\langle x \rangle$  simboliza a média estatística da variável aleatória  $x$ . A variável  $S$  dá a intensidade pela qual a oscilação aleatória faz com que a anisotropia microscópica seja observada na escala macroscópica. Para obter o valor do parâmetro de ordem escalar  $S$  basta multiplicar o lado esquerdo da expressão (73) pelo

parâmetro de ordem macroscópico,  $Q^{ij}(n)$ , e calcular o traço da expressão resultante,

$$Q_{ij}(n) \langle Q^{ij}(\hat{n}) \rangle = S Q_{ij}(n) Q^{ij}(n), \quad (74)$$

para obter[35]:

$$S = \frac{3}{2} \left( -\frac{1}{3} + \langle (\hat{n} \cdot n)^2 \rangle \right). \quad (75)$$

Se a superfície do potencial de interação de cada molécula/miscela de uma amostra de cristal líquido nemático for aproximada por uma equipotencial elipsoidal, então pode-se representá-la pela matriz  $E^{ij}$ . Quando, na vizinhança de um ponto, uma grande quantidade desses objetos são analisadas em conjunto, pode-se considerá-los, em analogia com a equação (73), que as moléculas em tal aglomerado podem estar (ou não) alinhadas, produzindo (ou não) uma fase nemática. A representação do resultado macroscópico deste alinhamento microscópico pode ser feita através da matriz  $Q_E^{ij}$  assumindo-se que ela satisfaz a mesma relação de um parâmetro de ordem microscópico:

$$\langle Q_E^{ij}(\hat{n}) \rangle = S Q^{ij}(n), \quad (76)$$

a qual indica que a anisotropia microscópica de cada domínio nemático torna-se acoplada com seus vizinhos, com o eixo maior de cada um oscilando ao longo da mesma direção, gerando uma fase nemática. Uma importante consequência do raciocínio acima é que as consequências macroscópicas surgem a partir da anisotropia elipsoidal microscópica de cada molécula do nemático. Assim que  $Q_E^{ij}$  aparece na definição de  $E^{ij}$ , a equação (72) revela que a matriz do elipsóide  $E^{ij}$  também tem um equivalente macroscópico. Isto é, ao dar significado a  $\langle Q_E^{ij} \rangle$  um significado correspondente também deve ser legado a  $\langle E^{ij} \rangle$ . Tal matriz mede a passagem de uma simetria microscópica isotrópica (o termo  $\delta^{ij}$ ), para um simetria

macroscópica elipsoidal da fase nemática. Assume-se aqui que essa anisotropia é atingida através da métrica macroscópica  $g^{ij}$ . Isto é,  $g^{ij} = N \langle E^{ij} \rangle$ , ou:

$$\begin{aligned} g^{ij} &= N \left\{ \frac{1}{3} \text{Tr} (\mathbb{E}) \delta^{ij} + \frac{e}{1-e} \langle Q^{ij} (\hat{n}) \rangle \right\} \\ &= \frac{N}{1-e} \left\{ \left(1 - \frac{e}{3}\right) \delta^{ij} + e S Q^{ij} (\mathbf{n}) \right\}, \end{aligned} \quad (77)$$

onde  $N$  é uma constante de normalização introduzida para garantir a normalização do diretor:

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

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

$$g^{ij} = \frac{1}{3 - e (1 + 2S)} \{ (3 - e) \delta^{ij} + 3 e S Q^{ij} (\mathbf{n}) \}, \quad (78)$$

e

$$g_{ij} = \frac{1}{3 - e (S - 1)} \{ (3 - e (S + 1)) \delta_{ij} + 3 e S Q_{ij} (\mathbf{n}) \}. \quad (79)$$

Nestas equações assumiu-se que a métrica induzida pela anisotropia elipsoidal depende do parâmetro de ordem escalar  $S$  e, portanto, ele é macroscópico e determinado pela temperatura nemática; na fase isotrópica ( $S = 0$ ) a métrica é esférica e medidas macroscópicas devem ser isotrópicas. À medida que a temperatura é reduzida, a transição de fase nemático-isotrópica cria um  $S$  não nulo, que induz uma anisotropia macroscópica.

Embora a função métrica determine todas as propriedades intrínsecas de um espaço métrico, uma análise superficial não permite dizer se ela descreve um espaço curvo ou plano[46]. Esta dificuldade decorre do fato de que a métrica depende de como se escolhe a malha de coordenadas, pois uma mudança, pois uma mudança de coordenadas altera a aparência da função métrica. De fato, a métrica de um espaço plano em coordenadas polares não se parece nem um pouco com a métrica de um espaço Euclidiano.

Como fora demonstrado no capítulo 3, o objeto que permite afirmar com segurança o caráter curvo do espaço é o tensor de Riemann-

Christoffel, ou ainda, em três dimensões, sua forma contraída, o tensor de Ricci. Para se chegar até estes elementos é preciso computar o valor da conexão afim, dada pela equação (31). Após longo e exaustivo trabalho consegue-se determinar seu valor quando a métrica é dada por (78):

$$\Gamma_k^{ij} = \frac{3eS}{2(3-e(1+2S))(3-e(1-S))} \left\{ (3-e(1+2S)) \left( n_k \left( \frac{\partial n^j}{\partial q_i} - \frac{\partial n^i}{\partial q_j} \right) + n^j \left( \frac{\partial n_k}{\partial q_i} - \frac{\partial n^i}{\partial q^k} \right) \right) - (3-e(1-S)) n^i \left( \frac{\partial n_k}{\partial q_j} + \frac{\partial n^j}{\partial q^k} \right) + 3eS n^i n_m \left( n_k \frac{\partial n^j}{\partial q_m} + \frac{\partial n_k}{\partial q_m} \right) \right\}.$$

Com o valor do símbolo de Christoffel em mãos pode-se encontrar o valor dos tensores curvatura e dos escalares de curvatura. O mais simples, e que é de interesse, é o traço do tensor de Ricci, pois ele é dependente de funções de até segunda ordem do diretor  $\square$ , e portanto mais simples de se calcular. Seu valor pode ser computado como função das relações presentes na equação mais abaixo (82) que simbolizam as configurações elementares do campo de diretores desde que se considere as seguintes igualdades:

$$\begin{aligned} \frac{\partial n_j}{\partial q_j} &= \nabla \cdot \mathbf{n} \\ n_j \frac{\partial n_k}{\partial q_j} - n_i \frac{\partial n^k}{\partial q_i} &= (\mathbf{n} \times \nabla \times \mathbf{n})^2 \\ \frac{\partial n^k}{\partial q_j} \frac{\partial n_k}{\partial q^j} &= (\nabla \cdot \mathbf{n})^2 + (\mathbf{n} \cdot \nabla \times \mathbf{n})^2 \\ &\quad + (\mathbf{n} \times \nabla \times \mathbf{n})^2 - \nabla \cdot [\mathbf{n} \nabla \cdot \mathbf{n} + \mathbf{n} \times \nabla \times \mathbf{n}] \\ \frac{\partial n^k}{\partial q_j} \frac{\partial n_j}{\partial q^k} &= (\nabla \cdot \mathbf{n})^2 - \nabla \cdot [\mathbf{n} \nabla \cdot \mathbf{n} + \mathbf{n} \times \nabla \times \mathbf{n}] \quad (80) \\ n_k \frac{\partial^2 n^j}{\partial q^j \partial q_k} &= \nabla \cdot (\mathbf{n} \nabla \cdot \mathbf{n}) - (\nabla \cdot \mathbf{n})^2 \\ n_k \frac{\partial^2 n^k}{\partial q^j \partial q_j} &= -(\nabla \cdot \mathbf{n})^2 - (\mathbf{n} \cdot \nabla \times \mathbf{n})^2 \\ &\quad - (\mathbf{n} \times \nabla \times \mathbf{n})^2 + \nabla \cdot [\mathbf{n} \nabla \cdot \mathbf{n} + \mathbf{n} \times \nabla \times \mathbf{n}] \\ n^i n^j n_k \frac{\partial^2 n^k}{\partial q_i \partial q_j} &= -(\mathbf{n} \times \nabla \times \mathbf{n})^2. \end{aligned}$$

O escalar de curvatura  $R = R_{ij}$  pode ser escrito como:

$$R = \frac{9e^2 S^2}{2(3-e(1-S))^2} (\mathbf{n} \cdot \nabla \times \mathbf{n})^2 - \frac{3eS}{3-e(1-S)} \nabla \cdot [\mathbf{n} \nabla \cdot \mathbf{n} + \mathbf{n} \times \nabla \times \mathbf{n}] . \quad (81)$$

Este resultado justifica todo o desenvolvimento feito até então. Ele revela que a curvatura escalar, associada com a textura de uma amostra de cristal líquido nemático, é diferente de zero. Além disso ela resulta da combinação de dois termos comuns de textura nemática, o termo de *twist*,  $(\mathbf{n} \cdot \nabla \times \mathbf{n})^2$ , e o termo de *saddle-splay*,  $\nabla \cdot [\mathbf{n} \nabla \cdot \mathbf{n} + \mathbf{n} \times \nabla \times \mathbf{n}]$ . Como  $R$  é uma quantidade escalar, esta será sempre a mesma em todos os sistemas de coordenadas e, portanto, ele não pode ser eliminado. A curvatura que ele expressa é uma propriedade básica do método da conexão afim; ela associa de maneira intrínseca as texturas nemáticas com a superfície curva.

## CAPÍTULO 5

### ELASTICIDADE

O princípio da equivalência estabelece que a partir da função métrica é possível encontrar um referencial local onde os efeitos da curvatura não se manifestam, ou seja, um espaço local plano. Nos cálculos realizados acima para encontrar a métrica operou-se uma transformação de coordenadas de um espaço plano, com métrica  $\delta^{ij}$  e coordenadas  $x_k$  para um espaço curvo com métrica  $g^{ij}$  e coordenadas  $q_k$ :

$$q_k = \frac{dq_k}{dx_j} x_j,$$

onde, de acordo com a métrica (78),

$$\frac{dq_k}{dx_j} = \frac{\sqrt{9 - 3(2+S)e + (1+S-2S^2)e^2}}{3 + (-1+S)e} \delta^j_k - \frac{3 + (-1+S)e + \sqrt{9 - 3(2+S)e + (1+S-2S^2)e^2}}{3 + (-1+S)e} n^j n_k;$$

Logo, para voltar ao espaço plano, basta realizar a transformação inversa de coordenadas

$$x_k = \frac{dx_k}{dq_j} q_j.$$

Nesse espaço plano, as superfícies equipotenciais dos domínios nemáticos assumem a forma esférica, que valida a aplicação de modelos de interação mais simples, conforme discutido anteriormente. Através desse modelo o cálculo das grandezas reológicas do material torna-se simples. Para encontrar a forma correspondente destas equações para os aglomerados elípticos basta fazer uso de um algoritmo baseado no princípio de equivalência[32]:

- é Substituir a métrica unitária  $\delta^{kj}$  por  $g^{kj}$ ;
- é Trocar todas as derivadas comuns por derivadas covariantes:

$$\partial_k \rightarrow D_k = \partial_k + \Gamma.$$

As equações obtidas por este processo serão válidas na presença da curvatura, ou seja, serão válidas para o nemático com domínios elípticos.

As configuração do campo de diretores pode ser descrita como uma combinação dos termos de *splay*, *bend*, *twist* e de superfície:

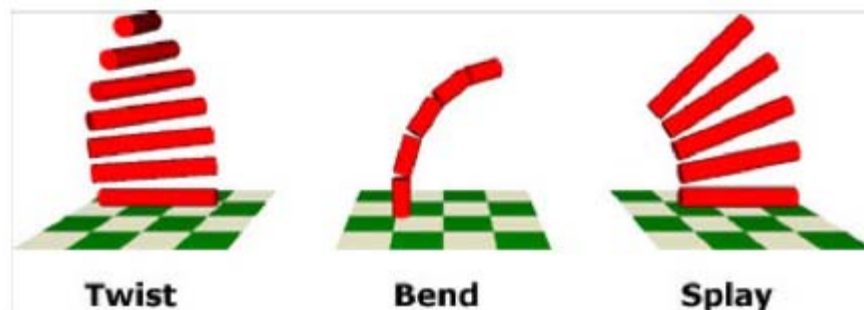
$$\begin{array}{ccc} (\nabla \cdot \mathbf{n})^2 & (\mathbf{n} \cdot \nabla \times \mathbf{n})^2 & (\mathbf{n} \times \nabla \times \mathbf{n})^2 \\ \textit{Splay} & \textit{Twist} & \textit{Bend} \end{array} \quad (82)$$

A configuração preferida pelo cristal líquido é aquela em que todas as moléculas estão alinhadas uniformemente. Nesta situação ideal existiria um único domínio nemático. Porém na realidade isto não ocorre, e cada grupo local de moléculas se alinha numa direção, dando origem às singularidades e defeitos no alinhamento.

Tais dislocações formam diversos tipos de texturas. Estas armazenam energia elástica pelo fato de estarem em configurações mais energéticas que no caso de alinhamento total. De acordo com a teoria elástica dos cristais líquidos, a energia relacionada à variação do diretor  $\mathbf{n}$  no espaço pode ser escrita como:

$$F = \frac{1}{2} \int_V d^3 r \{ K_{11} (\nabla \cdot \mathbf{n})^2 + K_{22} (\mathbf{n} \cdot \nabla \times \mathbf{n})^2 + K_{33} (\mathbf{n} \times \nabla \times \mathbf{n})^2 + K_{13} \nabla \cdot (\mathbf{n} \nabla \cdot \mathbf{n}) - (K_{22} + K_{24}) \nabla \cdot [\mathbf{n} \nabla \cdot \mathbf{n} + \mathbf{n} \times \nabla \times \mathbf{n}] \} \quad (83)$$

Esta equação é conhecida como energia livre de Frank. As três constantes elásticas  $K_{11}$ ,  $K_{22}$  e  $K_{33}$  acompanham os termos relacionados à elasticidade do interior da amostra (*bulk*): *splay*, *twist* e *bend* respectivamente, ilustrados abaixo:



**Figura 7** – Ilustração da conformação dos diretores nos três tipos de distorções elementares.

Os outros dois termos correspondem ao alinhamento dos diretores com a superfície do recipiente que contém o cristal líquido. Cálculos do equilíbrio da distribuição de diretores implica na minimização da integral (83).

Como demonstração da simplicidade deste método, e também para mostrar o que pode motivar doravante a sua aplicação, um modelo ingênuo para descrever a energia elástica será desenvolvido neste breve capítulo. As constantes elásticas de volume  $(K_{11}, K_{22}, K_{33})$  serão computadas com o uso da regra proposta logo acima, e os resultados serão comparados com aqueles obtidos utilizando-se derivadas comuns.

Uma extensão direta da lei de Hooke para o meio líquido cristalino deve ser coerente com a idéia de que, no entorno de determinado ponto, a energia elástica deve ser pelo menos proporcional à variação do diretor. Essa generalização também deve ser proporcional ao quadrado do parâmetro de ordem escalar[47]. Isto é:

$$E \approx \alpha S^2 (\partial_i n^j)^2.$$

Utilizando as regras de derivadas (80), sucede que, em termos das expressões usuais das texturas da fase nemática, esta equação pode ser reescrita como:

$$E \approx \alpha S^2 \{ (\nabla \cdot \mathbf{n})^2 + (\mathbf{n} \cdot \nabla \times \mathbf{n})^2 + (\mathbf{n} \times \nabla \times \mathbf{n})^2 - \nabla \cdot [\mathbf{n} \nabla \cdot \mathbf{n} + \mathbf{n} \times \nabla \times \mathbf{n}] \} \quad (84)$$

De acordo com este modelo simples, todas as constantes elásticas do cristal líquido nemático seriam idênticas, e nenhuma diferença entre seus valores seriam observada. Todavia, quando a derivada comum é substituída pela derivada covariante, depara-se com:

$$\begin{aligned} E &\approx \alpha S^2 (\partial_i n^j)^2 \rightarrow \alpha S^2 (D_i n^j) (D^i n_j) \\ &= \alpha S^2 g^{jk} g^{im} (D_i n_k) (D_m n_j) \end{aligned}$$

Após cálculos corriqueiros, encontra-se:

$$\begin{aligned} E &\approx \alpha S^2 \left\{ (\nabla \cdot \mathbf{n})^2 + \left( 1 - \frac{3e(6-e(S+2))}{2(3+e(S-1))^2} \right) (\mathbf{n} \cdot \nabla \times \mathbf{n})^2 + \right. \\ &\left. \left( 1 - \frac{3eS}{3+e(S-1)} \right) (\mathbf{n} \times \nabla \times \mathbf{n})^2 - \nabla \cdot [\mathbf{n} \nabla \cdot \mathbf{n} + \mathbf{n} \times \nabla \times \mathbf{n}] \right\} \end{aligned} \quad (85)$$

Revelando uma expressão não-trivial para as constantes elásticas:

$$\begin{aligned} K_{11} &\approx \alpha S^2, \\ K_{22} &\approx \alpha \left( 1 - \frac{3e(6-e(S+2))}{2(3+e(S-1))^2} \right) S^2, \\ K_{33} &\approx \alpha \left( 1 - \frac{3e(6-e(S+2))}{2(3+e(S-1))^2} - \frac{9e^2 S^2}{2(3+e(S-1))^2} \right) S^2 \end{aligned} \quad (86)$$

A introdução da derivada covariante neste modelo produz um resultado promissor. A razão de constantes  $K_{22}/K_{11}$  quando comparada com os dados experimentais é satisfatória, entretanto o valor da razão  $K_{33}/K_{11}$  está completamente equivocado. Uma análise preliminar revela que, mesmo para os mais simples dados experimentais de compostos calamíticos ( $e > 0$ ), as constantes elásticas estão relacionadas pela regra  $K_{22} < K_{11} < K_{33}$ [35]. Não obstante, as expressões acima obedecem à relação  $K_{33} < K_{22} < K_{11}$ . Mesmo assim este resultado não invalida o método proposto, pois é conhecida a dependência de  $K_{33}/K_{11}$  com a interação multipolar entre os domínios nemáticos[17], uma propriedade que não é observada em  $K_{22}/K_{11}$ .

Um modelo mais elaborado deve considerar, além da distância entre as moléculas, a orientação relativa entre elas. A interação angular[48] pode ser formulada em termos do produto tensorial do parâmetro de ordem:

$$I_j^1(\hat{p}, \hat{q}) = Q^{1k}(\hat{p}) Q_{kj}(\hat{q}). \quad (87)$$

Esta é uma função de variáveis aleatórias,  $\hat{p}$  e  $\hat{q}$ , localizadas em diferentes pontos  $r_1$  e  $r_2$  respectivamente. Apenas as quantidades termodinâmicas geradas por ela têm significado macroscópico. Para obtê-las assume-se que as partes conectadas da função de dois pontos  $\langle Q^{1k}(\hat{p}) Q_{kj}(\hat{q}) \rangle$  pode ser omitida, permitindo que se faça a aproximação[49]

$$\langle I_j^1(\hat{p}, \hat{q}) \rangle = \langle Q^{1k}(\hat{p}) \rangle \langle Q_{kj}(\hat{q}) \rangle.$$

Aplicando a equação (76) nesta igualdade obtém-se:

$$\begin{aligned} \langle I_j^1(\hat{p}, \hat{q}) \rangle &= S^2 Q^{1k}(p) Q_{jk}(q) \\ &= S^2 I_j^1(p, q). \end{aligned} \quad (88)$$

Esta é a equação básica a partir da qual as constantes elásticas podem ser calculadas[47]. Para formar escalares invariantes com este tensor pode-se contraí-lo com o raio vetor que representa a distância entre os domínios nemáticos  $\hat{p}$  e  $\hat{q}$ :

$$i(r_1, r_2) = \langle r^i r^j I_{ij}(\hat{m}, \hat{n}) \rangle = S^2 r^i r^j I_{ij}(m, n) \quad (89)$$

Através do produto  $r^i r^j$ , o escalar  $i$  acopla as moléculas nemáticas com interação angular separadas pela distância anisotrópica.

A mudança de coordenadas  $r_2 = r_1 + r$  resulta em:

$$\begin{aligned} Q_{kj}(r_2) &= Q_{kj}(r_1 + r) \\ &\approx Q_{kj}(r_1) + r^m D_m Q_{kj}(r_1) + \frac{1}{2} r^m r^n D_m D_n Q_{kj}(r_1). \end{aligned} \quad (90)$$

Utilizando a aproximação de campo médio encontra-se:

$$\begin{aligned}
\langle I_{ij}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \rangle &= \langle Q^{ik}(\mathbf{r}_1) Q_{kj}(\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}) \rangle \\
&\approx \langle Q^{ik}(\mathbf{r}_1) Q_{kj}(\mathbf{r}_1) \rangle + \langle Q^{ik}(\mathbf{r}_1) r^m D_m Q_{kj}(\mathbf{r}_1) \rangle + \\
&\quad \frac{1}{2} \langle Q^{ik}(\mathbf{r}_1) r^m r^n D_m D_n Q_{kj}(\mathbf{r}_1) \rangle.
\end{aligned} \tag{91}$$

Uma substituição útil para o produto de variáveis  $r^m r^n$  pode ser feita. Como  $r^m r^n$  é um tensor simétrico de segunda ordem, ele pode ser decomposto em termos dos tensores simétricos de segunda ordem naturais da teoria[18,28],  $Q^{mn}$  e  $\delta^{mn}$ :

$$r^m r^n = A Q^{mn} + B \delta^{mn}, \tag{92}$$

onde  $A(r)$  e  $B(r)$  são constantes a serem determinadas. O significado físico destas tem importância fundamental para a interpretação das constantes elásticas. Como o traço de  $Q^{mn}$  é nulo segue que:

$$B(r) = \frac{r^2}{3}.$$

Isso mostra que  $B(r)$  mede a componente isotrópica de  $r^m r^n$ , como já era evidente na equação (92). Entretanto o significado de  $A(r)$  não é tão evidente. Utilizando as relações  $Q^{mn} Q_{mn} = 2/3$  e  $Q^{mn} \delta_{mn} = 0$  obtém-se

$$A(r) = \frac{2}{3} r^m r^n Q_{mn},$$

evidenciando que  $A(r)$  é proporcional ao termo de energia quadrupolar, no ponto  $r$ [42].

Utilizando estas definições em  $\langle I_{ij}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \rangle$  obtém-se:

$$\begin{aligned}
\langle I_{ij}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \rangle &= \langle Q^{ik} Q_{kj} \rangle + \langle Q^{ik}(\mathbf{r}_1) r^m D_m Q_{kj}(\mathbf{r}_1) \rangle + \\
&\quad \frac{1}{2} \langle Q^{ik}(\mathbf{r}_1) (A Q^{mn} + B \delta^{mn}) D_m D_n Q_{kj}(\mathbf{r}_1) \rangle.
\end{aligned} \tag{93}$$

Nesta equação foi realizada a mudança  $\delta^{ij} \rightarrow g^{ij}$ , conforme indicado no princípio deste capítulo.

Reunindo todo o formalismo desenvolvido até este ponto pode-se prosseguir com o cálculo das constantes elásticas nemáticas. Assume-se que o termo  $i(r_1, r_2)$ , equação (89), contribui com a energia livre através de um termo com a forma

$$F_1 = F_0 + \int a_1(r_2 - r_1) \langle r^1 r^j I_{1j}(\hat{m}, \hat{n}) \rangle d^3 r_1 d^3 r_2. \quad (94)$$

Onde a equação (92) foi empregada. O fator  $a_1(r_2 - r_1)$  expressa os coeficientes da energia em termos de  $\langle I_{1j}(r_1, r_2) \rangle$ . Mudando os parâmetros de integração, definidos acima, obtém-se

$$F_1 = F_0 + \frac{1}{2} \int a_1(r) \{ \langle (A Q^{1j} + B g^{1j}) Q_j^k(r) \times (A Q^{mn} + B g^{mn}) D_m D_n Q_{k1}(r_1) \rangle \} d^3 r_1 d^3 r_2. \quad (95)$$

Onde os dois primeiros termos de (93) foram emitidos por não serem termos nemáticos. Realizando as substituições

$$\begin{aligned} c_1 &= \int a_1(r) (B(r))^2 d^3 r = \frac{1}{9} \int r^4 a_1(r) d^3 r, \\ c_2 &= \int a_1(r) A(r) B(r) d^3 r = \int r^2 r^m r^n Q_{mn} a_1(r) d^3 r, \\ c_3 &= \int a_1(r) (A(r))^2 d^3 r = \int r^m r^n r^o r^p Q_{mn} Q_{op} a_1(r) d^3 r, \end{aligned}$$

chega-se à equação:

$$F_1 = F_0 + \frac{1}{2} \int \{ \langle (A^2 Q^{1j} + A B Q^{1j} g^{mn} + A B Q^{mn} g^{1j} + B^2 g^{1j}) Q_j^k(r) \times D_m D_n Q_{k1}(r_1) \rangle \} d^3 r_1 d^3 r_2.$$

Utilizando as definições de derivada covariante dadas no capítulo 3, pela equação (35), junto com as transformações (80), obtém-se uma equação com o formato da Energia Livre de Frank, eq. (83):

$$F_i = F_0 + \frac{1}{2} \int \{K_{11} (\nabla \cdot \mathbf{n})^2 + K_{22} (\mathbf{n} \cdot \nabla \times \mathbf{n})^2 + K_{33} (\mathbf{n} \times \nabla \times \mathbf{n})^2 + K_S \text{TS}\} d^3 r,$$

onde as constantes elásticas valem:

$$\begin{aligned} K_{11} &= \frac{-c_1 S^2}{27 (3 - e (1 - S))^3 (3 - e (1 + 2 S))} \Omega_1, \\ K_{22} &= \left( 1 - \frac{3 e}{2} \frac{(6 - e (S + 2))}{(3 + e (S - 1))^2} \right) K_{11}, \\ K_{33} &= \frac{-c_1 S^2}{27 (3 - e (1 - S))^3} \Omega_3, \end{aligned} \quad (96)$$

e

$$\begin{aligned} \Omega_1 &= 9 (3 - e (1 - S))^2 (63 - 3 e (14 + S) + e^2 (7 + S + 10 S^2)) + \\ &\quad - 3 S (40 e^4 S^4 + (3 - e) \\ &\quad \quad ((3 - e)^3 + 52 (3 - e)^2 e S + 33 (3 - e) e^2 S^2 + 22 e^3 S^3)) \rho_1 + \\ &\quad - 2 S^2 (4 (3 - e)^3 + 18 (3 - e)^2 e S - 3 (3 - e) e^2 S^2 + 10 e^3 S^3) \\ &\quad (3 - e (1 + 2 S)) \rho_2 \\ \Omega_3 &= \{9 (3 + e (-1 + S)) (63 - 6 e (7 + 2 S) + e^2 (7 + 4 S (1 + 4 S))) + \\ &\quad - 3 S (-19 (-3 + e)^3 + \\ &\quad \quad 48 (-3 + e)^2 e S - 12 (-3 + e) e^2 S^2 + 64 e^3 S^3) \rho_1 + \\ &\quad + 2 S^2 (-5 (-3 + e)^3 + 42 (-3 + e)^2 e S + \\ &\quad \quad 12 (-3 + e) e^2 S^2 + 32 e^3 S^3) \rho_2 \} \end{aligned} \quad (97)$$

$$\begin{aligned} \rho_1 &= \frac{\int \mathbf{a}_1(\mathbf{r}) \mathbf{A}(\mathbf{r}) \mathbf{B}(\mathbf{r}) d^3 r}{\int \mathbf{a}_1(\mathbf{r}) (\mathbf{B}(\mathbf{r}))^2 d^3 r} = 2 \frac{\int r^2 r^m r^n Q_{mn} a_1(\mathbf{r}) d^3 r}{\int r^4 a_1(\mathbf{r}) d^3 r} \\ \rho_2 &= \frac{\int \mathbf{a}_1(\mathbf{r}) (\mathbf{A}(\mathbf{r}))^2 d^3 r}{\int \mathbf{a}_1(\mathbf{r}) (\mathbf{B}(\mathbf{r}))^2 d^3 r} = 4 \frac{\int r^m r^n r^o r^p Q_{mn} Q_{op} a_1(\mathbf{r}) d^3 r}{\int r^4 a_1(\mathbf{r}) d^3 r}. \end{aligned}$$

Um aspecto notável das relações (96) é que a razão

$$r_{21} = \frac{K_{22}}{K_{11}} = 1 - \frac{3 e}{2} \frac{(6 - e (S + 2))}{(3 + e (S - 1))^2}, \quad (98)$$

é exatamente igual à razão obtida com os valores dados na equação (86). Ela não depende do momento de quadrupolo da molécula nemática, é determinada completamente pela excentricidade  $e$  e pelo parâmetro de ordem escalar  $S$ . No

entanto, ao contrário desta propriedade, a relação  $r_{31} = K_{33}/K_{11}$  também depende do parâmetro de ordem  $Q^i$ .

Portanto, um gráfico dos dados experimentais de  $r_{21}$  como função de  $S$  pode ser utilizado para determinar os valores de  $e$ . E, em seguida, após obter o valor da excentricidade, um gráfico de  $r_{31}$  em função de  $S$  pode ser utilizado para encontrar  $\rho_1$  e  $\rho_2$ . Como as constantes elásticas dependem de  $e$ ,  $\rho_1$ ,  $\rho_2$  e  $c_1$  e  $S$ , a determinação de  $c_1$  é suficiente para determinar os valores de  $K_{11}$ ,  $K_{22}$  e  $K_{33}$  como função de  $S$ .

De acordo com as relações encontradas acima, através da excentricidade  $e$  e do parâmetro de ordem escalar  $S$ , a razão  $r_{21}$  fica determinada completamente pela geometria das células nemáticas. Enquanto que  $r_{31}$  depende do momento quadrupolar das moléculas nemáticas. Esta dependência é traduzida pelas constantes  $\rho_1$  e  $\rho_2$ . A primeira mede o momento de quadrupolo, e a segunda dá uma medida do "momento quadrupolar quadrático".

Estes resultados concordam muito bem com dados experimentais, fato este que valida a aplicação do método proposto neste trabalho. No entanto essa comparação está fora do escopo deste.

## CAPÍTULO 6

### CONCLUSÃO

Neste trabalho mostrou-se que uma amostra de cristal líquido nemático, com uma distribuição de diretores não-homogênea, pode ser descrito por uma variedade diferenciável não-plana com curvatura escalar não-nula determinada por dois tipos comuns de texturas nemáticas: os termos de *twist* e de *saddle-splay*, ambos relacionados com a elasticidade nemática. Um aspecto interessante deste resultado é que exhibe um contraste interessante entre a elasticidade e a curvatura de um material nemático; existem deformações elásticas que não contribuem com a curvatura assim como existem ternos de curvatura que não contribuem para a elasticidade. Isto é, enquanto os termos de *splay* e *bend* contribuem para a elasticidade, eles não apresentam nenhuma contribuição direta à curvatura escalar e, por outro lado, enquanto o termo de *saddle-splay* contribui para a energia elástica na superfície da amostra, sua contribuição para a curvatura se espalha por todo material nemático.

Como consequência desses resultados, a regra para se operar a diferenciação foram modificadas pela introdução da conexão afim que imprime os efeitos da curvatura na derivada, ou seja, fez-se o emprego da derivada covariante. A conexão foi calculada a partir da métrica que torna real a hipótese do método da conexão afim: o potencial gerado por uma molécula elipsoidal de um nemático pode ser obtido através da distorção do potencial de uma molécula esférica, que é deformada até assumir a forma do elipsóide correspondente. Como a deformação da esfera em um elipsóide é descrita por um objeto que tem a mesma forma do tensor parâmetro de ordem, ela pode ser tomada como o parâmetro de ordem microscópico e, na passagem deste para o parâmetro de ordem macroscópico, a métrica deduzida torna-se dependente da temperatura. Este resultado é crucial.

Como indica o desenvolvimento do início da seção 3.10, o símbolo de Christoffel pode ser interpretado como o campo de forças que gera, entre

outras propriedades, a elasticidade característica do meio nemático. Com efeito, no primeiro modelo apresentado, quando se fez uso apenas das derivadas usuais, não havia distinção entre os diversos tipos de constantes elásticas, foi com a introdução da derivada covariante que surgiram as diferenças entre elas. Ademais, pode-se notar na fórmula da derivada covariante, equação (35), que a conexão afim é responsável pela transmissão dos efeitos da curvatura do espaço aos vetores que se distribuem sobre este. Mas apenas quando se considera a anisotropia macroscópica é que o modelo gera resultados similares aos dados experimentais. Pode-se dizer que a anisotropia microscópica gera uma superfície curva. Uma consequência direta desta interpretação é que a métrica pode ser entendida como o potencial de energia armazenada no cristal líquido, que se converte numa miríade de outros tipos de energia, entre os quais a elástica pode ser contada.

Como exercício da aplicação deste formalismo, ele foi aplicado na descrição dos termos de elasticidade de volume (*bulk*) de um cristal líquido nemático, e comparado com o resultado obtido sem a utilização de derivadas covariantes. Um outro modelo, mais elaborado também foi proposto e, confrontado com dados experimentais, revelou a qualidade dos resultados e a validade do método.

Finalmente, deve-se salientar que o uso do método apresentado não se restringe ao cálculo de constantes elásticas. De fato, a técnica da conexão afim principiou-se com o cálculo da viscosidade de nemáticos, e a abordagem aqui introduzida pode ser utilizada no cálculo de qualquer grandeza da dinâmica dos fluidos nemáticos, e até de outras fases de cristais líquidos.

## REFERÊNCIAS

- [1] Oseen, C.W. ; Trans.Faraday Soc.29, 883 (1993)
- [2] Zocher, H. ; Trans.Faraday Soc.29, 945 (1993)
- [3] Frank, F.C. ; Discuss.Faraday Soc.25, 19 (1958)
- [4] Chen, G.P., Takezoe, H., Fukuda, A. ; Liquid Crystals 5, 341 (1989).
- [5] de Jeu, W.H., Classen, W.A.P., Spruijt, M.J. ; Mol. Liq. Cryst. 37, 269 (1976) .
- [6] Madhusudana, N.V., Karat, P.P., Chandrasekhar, S. ; Pramana, suppl n .1, 225 (1975)
- [7] Gruler, H., Sheffer, T.J., Meier, G.Z. ; Naturforsch 27 a 996 (1972)
- [8] Scharkowski, S., Schmiedel, H., Srannarius, R., Weishuhn, E. ; Naturforsch 45 a 942 (1990)
- [9] Allen, M.P., Frenkel, D. ; Physical Review A 37, R1813 (1988)
- [10] Osipov, M.A., Hess, S. ; Liq. Cryst. 16, 845 (1994)
- [11] Nehring, J., Saupe, A. ; J.Chem. Phys. 54, 337 (1971) ; 56, 5527 (1972)
- [12] Vertogen, G., Flapper, S.D., Dullemond, C. ; J.Chem. Phys .76, 616 (1982)
- [13] Vertogen, G. ; Phys. Let. A89, 448 (1983)
- [14] Vertogen, G. ; Physica A117, 227 (1983)
- [15] Osipov, M.A., Hess, S. ; Mol. Phys .78, 1191 - 1201 (1993)

- [16] Osipov, M.A., Hess, S.; Chem. Phys. 99, 4181 - 4190 (1993)
- [17] Simões, M., Simeão, D.S.; Phys. Rev. E 73, 062702 (2006)
- [18] Barbero, G., Evangelista, L.R.; An elementary Course on the Continuum for Nematic Liquid Crystals, Word Scientific (2001)
- [19] Oldano, C., Barbero, G.; J. Phys (Paris) Lett. 46, 451 (1985)
- [20] Oldano, C., Barbero, G.; Phys Lett. 110 A, 213 (1985)
- [21] Barbero, G., Oldano, C.; Nuovo Cimento D 6, 479 (1985)
- [22] Stallinga, S., Vertogen, G.; Physical Review E 53, 1962 (1996)
- [23] Baalss, D., Hess, S.; Phys. Rev. Lett. 57, 86 (1986)
- [24] Baalss, D., Hess, S.; Z. Naturforsch A 43, 662 (1988)
- [25] Sollich, H., Baalss, D., Hess, S.; Mol. Cryst. Liq. Cryst. 168, 189 (1989)
- [26] Hess, S., Schwarzl, J.F., Baalss, J.; Phys Cond. Matter SA279 (1990)
- [27] Ehrentraut, H., Hess, S.; Phys. Rev. E 51, 2203 (1995)
- [28] Evangelista, L.R., Hibler, I., Mukai, H.; Physical Review E 58, 3245 (1998)
- [29] Barbero, G., Evangelista, L.R.; in Physics of Liquid Crystalline Materials, edited by Khoo, Gordon and Breach, New York, 1993
- [30] Barbero, G., Evangelista, L.R.; Phys. Rev. E 56, 6189 (1997)
- [31] Barbero, G., Evangelista, L.R., Giocondo, M., Ponti, S.; J. Phys. II 4, 1519 (1994)
- [32] Weinberg, S.; in Gravitation and Cosmology : principles and applications of the general theory of relativity. USA : John Wiley & Sons, 1972. Capítulo 4

- [33] Satiro, C., Moraes F.; European Physical Journal E 20 (2) :  
173 - 178 (2006)
- [34] Matthews, R.; Liquid Crystals :  
the paradoxical problems solvers.  
Disponível em : [http://www.geocities.com/omegaman\\_UK](http://www.geocities.com/omegaman_UK).  
Acesso em : 14 novembro 2006
- [35] de Gennes, P.G., Prost., J.; The Physics of Liquid Crystals.  
England : Claredon Press, Oxford. Segunda ed .1993.
- [36] The Basics about Liquid Crystals. Disponível em :  
<http://www.elis.ugent.be/ELISgroup/lcd/lc>
- [37] Crampin, M., Pirani, F.A.E.;  
Applicable Differential Geometry.  
London Mathematical Society Lecture Notes Series.  
Surrey : Cambridge University Press, n.59, 1988.
- [38] Schwartz, M., Green, S., Rutledge, W.;  
Differential Geometry. In : \_\_\_\_ : Vector Analysis with  
applications to geometry and physics. Japão : Harper &  
Rowet John Weatherhill, 1973.
- [39] Tahan, M.; O homem que calculava. Rio de Janeiro : Record.  
2003. Capítulo 11.
- [40] Guggenheimer, H.W.;  
Differential Geometry. Canada : Dover .1977.
- [41] What is Topology?
- [42] Goldstein, H.; Classical Mechanics. 2 ed. USA : Addison - Wesley.  
1980.
- [43] Arfken, G.B., Weber, H.J.;  
Mathematics Methods for Physicists.  
4 ed. Nova York : Academic Press, 1995. Capítulo 1.
- [44] Weinberg, S.; in Gravitation and Cosmology :  
principles and applications of the general theory of  
relativity. USA : John Wiley & Sons, 1972. Capítulo 6

- [45] Jackson, J.D. ; Classical Eletrodynamics. 2 ed. New York :  
John Willey & Sons, 1985.
- [46] Weinberg, S. ; in Gravitaion and Cosmology :  
principles and applications of the general teory of  
relativity. USA : John Willey & Sons, 1972. Capítulo 1.
- [47] Berreman, J.D., Meiboom, S. ; Physical Review A 30, 1955 (1984)
- [48] Gramsbergen, E.F., Longa, L., de Jeu, W.H. ;  
Physics Reports 135, 195 (1986)
- [49] Landau, L.D., Lifchitz, E.M. ; Statistical Physics.  
Londres : Pergamon, 1959.
- [50] Cyrillo, M., Menon, M.J. ; Rev. Bras. de Ens. de Física 18,  
3 (1996).