



UNIVERSIDADE  
ESTADUAL de LONDRINA

---

RAFAEL FIGUEIREDO COBO

**O ESCALAR DE CURVATURA E A ENERGIA LIVRE DE  
FRANK**

---

Londrina  
2014

RAFAEL FIGUEIREDO COBO

**O ESCALAR DE CURVATURA E A ENERGIA LIVRE DE  
FRANK**

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

Orientador: Prof<sup>o</sup>. Dr. Manuel Simões Filho.

Londrina  
2014

**Catálogo elaborado pela Divisão de Processos Técnicos da Biblioteca Central da  
Universidade Estadual de Londrina**

**Dados Internacionais de Catalogação-na-Publicação (CIP)**

C657e Cobo, Rafael Figueiredo.

O escalar de curvatura e a energia livre de Frank / Rafael Figueiredo Cobo.  
– Londrina, 2014.

118 f. : il.

Orientador: Manuel Simões Filho.

Tese (Doutorado em Física) – Universidade Estadual de Londrina, Centro de  
Ciências Exatas, Programa de Pós-Graduação em Física, 2014.

Inclui bibliografia.

1. Cristais líquidos nemáticos – Teses. 2. Constantes físicas – Teses. 3. Energia livre – Teses. 4. Curvatura – Teses. 5. Cristais líquidos – Teses. I. Simões Filho, Manuel. II. Universidade Estadual de Londrina. Centro de Ciências Exatas. Programa de Pós-Graduação em Física. III. Título.

CDU 532.783

RAFAEL FIGUEIREDO COBO

**O ESCALAR DE CURVATURA E A ENERGIA LIVRE DE  
FRANK**

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

**BANCA EXAMINADORA**

---

Prof. Dr. Manuel Simões Filho  
UEL – Londrina – PR

---

Prof. Dr. Márcio Pazetti  
UNIVASF - Juazeiro – BA

---

Prof. Dr. David da Silva Simeão  
UTFPR – Londrina – PR

---

Prof. Dr. Antônio José Palangana  
UEM – Maringá – PR

---

Prof. Dr. Newller Marcelo Kimura  
UEM – Maringá – PR

Londrina, 11 de Julho de 2014.

*Esse trabalho é dedicado a todos que me apoiaram, minha família, minha companheira e meus amigos.*

## AGRADECIMENTOS

Agradeço a minha Família, minhas tias Anna e Astrogilda, que me apoiaram durante todos esses anos, que foram dedicados a vida acadêmica, permitindo que pudesse me qualificar sem maiores preocupações.

A minha namorada, Edinara, que participou desses anos em que estive envolvido com o doutoramento e que soube ser paciente em momentos difíceis, que me encorajou em tantos outros. Agradeço ainda pelas leituras e observações feitas referentes a esse trabalho

Agradeço ao Prof. Dr. Manuel Simões Filho, pela orientação durante toda essa jornada, pela compreensão em diversos momentos complicados no andamento e confecção deste trabalho.

Aos meus amigos, que fizeram parte dessa caminhada compartilhado espaços, discussões no departamento de Física, tornando o período de doutorado agradável e aos meus amigos que mesmo não fazendo parte da “física”, me apoiaram nessa jornada.

Ao CNPq, pelo auxílio financeiro.

A todos que indiretamente colaboraram para a realização desse trabalho.

*O começo de todas as ciências é o espanto de as coisas serem o que são.*

(Aristóteles)

Cobo, R. F. **O Escalar de Curvatura e a Energia Livre de Frank**. 2014. N°118 f. Tese (Doutorado em Física) – Universidade Estadual de Londrina, 2014.

## RESUMO

Neste trabalho é mostrado que as constantes elásticas são conectadas através de uma relação obtida a partir do cálculo do escalar de curvatura, para um cristal líquido nemático com o campo diretor não homogêneo, e da relação entre o escalar e a Energia Livre de Frank. A relação calculada entre as constantes elásticas fornece um resultado teórico que possui um caráter constante e, a partir de dados experimentais para  $K_{11}$ ,  $K_{22}$  e  $K_{33}$  foi possível realizar um registro gráfico que permitiu um estudo da relação encontrada. Essa análise mostrou que a relação entre as constantes elásticas possui um comportamento próximo do valor teórico esperado quando próximo da transição de fase líquido-isotrópico. Entretanto, esse comportamento não ocorre durante toda a mesofase nemática, contudo, esse resultado ainda é expressivo, visto que foi encontrado uma relação que conecta as constantes elásticas obtidas a partir de parâmetros geométricos, o que exclui a necessidade de hipóteses adicionais a respeito das interações entre os constituintes da amostra.

**Palavras-chave:** Nemáticos; Curvatura; Constantes Elásticas; Energia Livre de Frank:

Cobo, R. F. **The scalar Curvature Tensor and the Free Energy of Frank.** 2014. N°118 f. Tese (Doutorado em Física) – Universidade Estadual de Londrina, 2014.

## ABSTRACT

In this work it is shown that the elastic constants are connected by a relation obtained from the calculation of the scalar curvature of a nematic liquid crystal with a not homogeneous director field, and the relationship between the scalar and the Free Energy of Frank. The relationship between the calculated elastic constants provides a theoretical result that has a constant feature, from experimental data for  $K_{11}$ ,  $K_{22}$  and  $K_{33}$  was possible to realize a graphic record allowing a study of the relationship found. This analysis showed that the relationship for the elastic constants have a close behavior to the theoretical value expected when near to the phase transition liquid-isotropic. However, this behavior does not occur throughout the nematic mesophase, yet, this result is still expressive, seen that was found a relation that connects the elastic constants obtained from geometric parameters, which excludes the need of an additional hypothesis about the interactions between the constituents of the sample.

**Key words: Nematic; Curvature; Elastic Constants; Frank's Free Energy**

## LISTA DE FIGURAS

1.1	Estrutura cristalina na qual tem-se a rede (as linhas do cubo) e a base (os átomos constituintes, representados pelos círculos nos vértices). . . . .	19
1.2	Representação de um líquido com moléculas esféricas. A simetria esférica diz respeito a simetria do potencial de interação entre as moléculas. . . . .	19
1.3	Representação pictórica para a transição de fase líquida isotrópica/sólido cristalina com o aparecimento de uma mesofase para sistemas termotrópicos com moléculas calamíticas. A transição para uma mesofase depende do aumento ou da diminuição da temperatura, representada pelas linhas direcionadas no sentido da mudança de temperatura. . . . .	20
1.4	Fórmula orgânica e geometria das moléculas calamíticas e discóticas. . . . .	21
1.5	Representação de estruturas formadas por liotrópicos, como lamelas e micelas, dependendo da concentração. A Molécula anfífilica está representada pela letra <b>(a)</b> na figura. . . . .	21
1.6	Representação da fase pura do sabão, ou lamelar, em que as moléculas se estruturam repelindo a água através de sua parte hidrofóbica. Imagem adaptada de [13] . . . . .	22
1.7	Fase hexagonal do sabão, mesofase liotrópica. . . . .	22
1.8	Representação da estrutura química da molécula de PAA. . . . .	23
1.9	Representação da estrutura química da molécula de MBBA. . . . .	23
1.10	Representação pictórica da orientação preferencial de moléculas calamíticas. A direção média é fornecida pelo vetor diretor <b>n</b> . . . . .	24
1.11	Representação de um nemático, em que as setas fornecem as orientações individuais dos dipolos de cada molécula, que são indistinguíveis. . . . .	24
1.12	Representação para um nemático biaxial. Os eixos representam o diretor principal <b>n</b> , e os secundário <b>n</b> <sub>1</sub> e <b>n</b> <sub>2</sub> . Isso possibilita a visualização da simetria dois a dois. Imagem adaptada de [12]. . . . .	25
1.13	Representação pictórica para a mesofase nemática discótica. Adaptada de [13]. . . . .	25
1.14	Representação da mesofase esméctica A, com as moléculas orientadas na média na direção normal ao plano das camadas. . . . .	26
1.15	Representação pictórica para a fase esméctica C, no qual pode-se perceber que as moléculas são inclinadas em relação a normal ao plano das. . . . .	26
1.16	Estrutura helicoidal de um colestérico. Pode-se perceber a orientação média das moléculas, dada pelo vetor diretor girando em relação a direção perpendicular a <b>n</b> . Imagem adaptada de [13]. . . . .	27

2.1	Representação dos sistemas de coordenadas do laboratório $(x, y, z)$ e fixo na molécula $(\xi, \eta, \zeta)$ e, os ângulos de Euler $\phi, \psi$ entre a normal ao plano $z - \zeta$ e os eixos $\eta$ e $x$ respectivamente e $\theta$ . Figura adaptada de [18]. . . . .	29
2.2	Representações pictóricas para as deformações <i>Splay</i> , associada a constante elástica $k_1$ , <i>Twist</i> e <i>Bend</i> , relacionadas as constantes $K_2$ e $K_3$ respectivamente. Imagem adaptada de [12]. . . . .	36
3.1	(a) é uma reta, delimitada por dois pontos, ou seja, uma reta euclidiana; (b) e (c) são retas entortando com magnitudes diferentes, ou seja, se afastam de um referencial com inclinações e velocidades diferentes. . . . .	38
3.2	Círculos de raios diferentes e com curvaturas diferentes, em que do maior para o menor o raio diminui e a curvatura aumenta, em relação ao referencial adotado. A partir da definição matemática para curvatura ficará mais obvio essa relação. . . . .	38
3.3	Círculo de raio $a$ , centrada na origem do plano orientado pelos eixos coordenados $x - y$ , que permite a modelagem para encontrar como uma reta desvia curvando-se, em relação a um eixo coordenado. . . . .	39
3.4	Representação de uma curva $C$ dependente do parâmetro $t$ , em que pode ser entendida como o deslocamento ponto a ponto de uma partícula em função do tempo, no plano $x - y$ . . . . .	41
3.5	Círculo interno a curva no ponto $p$ , centrado em $c$ , representando o raio de curvatura, recíproco da curvatura, no ponto $p$ . . . . .	44
3.6	Curva parametrizada em $t$ , em que será dependente das componentes $x, y$ e $z$ , ambos dependentes do parâmetro natural. . . . .	46
3.7	Representação do plano osculador, formado pelos vetores $v$ e $n$ , no qual o vetor binormal, estará apontando na direção que a curva ascende ou descende. . . . .	47
3.8	Representação de uma curva com curvatura e torção constante formando uma hélice no espaço. A curva possui uma torção constante, o que pode ser observado pelo raio constante, $r = \frac{1}{2}$ , da espiral formada. . . . .	49
3.9	Representação de uma superfície bidimensional em um espaço $\mathbb{R}^3$ , com os vetores tangentes as direções principais, a partir de um ponto arbitrário $p$ . Imagem adaptada de [22]. . . . .	50
3.10	Representação de uma superfície dada pelo vetor posição $r = r(\mu, \nu)$ . São mostrados os vetores tangente apontando nas direções principais e o vetor normal perpendicular a ambos. Imagem adaptada de [22] . . . . .	59
4.1	Dois pontos em uma vinhança no Manifold arbitrário, observando que apesar de sua representação plana, não há interesse em cálculo vetorial no plano, pois não trará informações adicionais. . . . .	72

4.2	Tensores avaliados em pontos distintos em uma vizinhança da variedade topológica diferenciável, em que se representa o “arrasto” do tensor de um ponto $Q$ a $p$ , no qual as quantidades $x^a(p)$ e $x^a(Q)$ , é uma curva sobre a variedade, no qual estão os pontos. A partir dessa curva pode-se construir vetores tangentes, $\frac{dx^a}{d\mu}$ , permitindo, ao se avaliar todas as curvas congruentes, a determinação de um campo tensorial, $X^a(\mu)$ . Figura adaptada de [26]. . . . .	76
4.3	Representação para o transporte paralelo do tensor do ponto $P$ ao ponto $Q$ , observando que essa representação não está em escala. Figura adaptada de [26]. . . . .	78
5.1	Distribuição dos dados experimentais registrados na Tabela 5.1, representando a concordância entre a relação $E_r$ medidas em função da temperatura reduzida, definida pelos autores do texto citado, para o composto $5CB$ , no qual o ponto 1 é a temperatura de transição de fase nemática isotrópica. . . . .	100
5.2	Distribuição dos dados experimentais registrados no Apêndice C, representando a concordância entre a relação $E_r$ medidas em função da temperatura, para a série homologa $n - CB$ , no qual o ponto 1 é a temperatura de transição de fase nemática isotrópica e o ponto 0 é a transição nemático-cristalino. . . . .	101
5.3	Distribuição dos dados experimentais para os compostos MBBA e PAA representando a concordância entre a relação $E_r$ medidas em função da temperatura, na qual é utilizada a temperatura nemática. . . . .	102
5.4	Distribuição dos dados experimentais para o composto MBBA representando a concordância entre a relação $E_r$ medidas em função da temperatura reduzida. . . . .	103
A.1	Gráfico construído a partir das contantes elásticas, do composto $6CB$ , em função da temperatura . . . . .	112
A.2	Distribuição dos dados experimentais registrados na Tabela A.2, representando a concordância e o comportamento das constantes elásticas obtidas a partir da relação $E_r$ em função da temperatura para o composto $7CB$ . . . . .	113
A.3	Distribuição dos dados experimentais registrados na Tabela A.3, representando a concordância entre a relação $E_r$ medidas em função da temperatura para o composto $8CB$ . . . . .	114
B.1	Representação de superfícies com pontos elípticos, onde a superfície curva-se em todas as direções por igual. A ilustração (a) representa uma superfície com mínimo local enquanto que a superfície (b) possui um máximo, sendo ambos os pontos elípticos. . . . .	116

B.2	Representação de uma superfície com um ponto de sela, em que a segunda forma possui sinais diferentes dependendo da direção. Imagem adaptada de [24]. . . . .	116
-----	---	-----

## SUMÁRIO

<b>INTRODUÇÃO</b>	<b>16</b>
<b>1 INTRODUÇÃO À FÍSICA DOS CRISTAIS LÍQUIDOS</b>	<b>18</b>
1.1 Classificação dos Cristais Líquidos . . . . .	20
1.1.1 Cristais Líquidos Termotrópicos . . . . .	20
1.1.2 Cristais Líquidos Liotrópicos . . . . .	21
1.2 Classificação das Mesofases . . . . .	23
1.2.1 Mesofase Nemática . . . . .	24
1.2.2 Mesofase Esmética . . . . .	26
1.2.3 Mesofase Colestérica . . . . .	27
<b>2 INTRODUÇÃO À TEORIA DO CONTÍNUO NAS MESOFASES NE- MÁTICAS</b>	<b>28</b>
2.1 Parâmetro de Ordem . . . . .	28
2.1.1 Aproximação Microscópica . . . . .	28
2.1.2 Aproximação Macroscópica . . . . .	30
2.1.3 A Relação entre os Parâmetros de Ordem Macroscópico e Microscópico	32
2.2 Energia de Deformação . . . . .	33
<b>3 GEOMETRIA DIFERENCIAL</b>	<b>38</b>
3.1 Curvas no Plano . . . . .	40
3.1.1 Representação Analítica de Curvas . . . . .	40
3.1.2 Curvatura e as Fórmulas de Serret-Frenet . . . . .	42
3.2 Curvas no Espaço $\mathbb{R}^3$ . . . . .	46
3.2.1 Torção de uma Curva e o Triedro de Serret-Frenet . . . . .	48
3.3 Geometria de Superfícies . . . . .	50
3.3.1 Superfícies em $\mathbb{R}^3$ - Representação Analítica . . . . .	50
3.3.2 Curvas, Superfícies e a Primeira Forma Fundamental . . . . .	51
3.3.3 Segunda Forma Fundamental . . . . .	54
3.3.4 A Curvatura de Gauss . . . . .	56
3.4 As Equações Fundamentais da Superfície . . . . .	59
3.4.1 As Equações de Gauss-Weingarten . . . . .	59
3.4.2 O Teorema de Gauss e as Equações de Codazzi . . . . .	64
3.4.3 Curvatura Tangencial e Geodésicas . . . . .	67
3.4.4 As Equações para as Geodésicas . . . . .	68

<b>4</b>	<b>TENSORES</b>	<b>70</b>
4.1	Manifolds . . . . .	70
4.2	Tensores Contravariante e Covariante . . . . .	72
4.2.1	Tensor Contravariante . . . . .	72
4.2.2	Tensor Covariante . . . . .	73
4.2.3	Simetria e Anti-Simetria . . . . .	74
4.3	Derivada de Tensores . . . . .	74
4.3.1	A Derivada de Lie . . . . .	75
4.3.2	A Derivada Covariante . . . . .	77
4.3.3	Derivada Absoluta . . . . .	79
4.4	Tensor Métrico . . . . .	80
4.5	Geodésicas . . . . .	82
4.6	Comutatividade Da Derivada Covariante E O Tensor De Riemann . . . . .	83
4.7	O tensor de Ricci e o Escalar de Curvatura . . . . .	84
4.8	As Equações da Superfície Revisitadas . . . . .	85
4.8.1	Equações de Weingarten . . . . .	87
4.8.2	Equações de Codazzi e o Teorema de Egregium . . . . .	87
4.8.3	Tensor de Riemann e a Curvatura de Gauss . . . . .	88
<b>5</b>	<b>O ESCALAR DE CURVATURA E A ENERGIA LIVRE DE FRANK</b>	<b>90</b>
5.1	Amostra Nemática com o Campo Diretor Localmente Variável . . . . .	91
5.2	Métrica . . . . .	93
5.3	Conexão e o Tensor Curvatura . . . . .	95
5.4	O Escalar de Curvatura . . . . .	97
5.5	As Constantes Elásticas a Partir do Escalar de Curvatura . . . . .	98
	<b>CONSIDERAÇÕES FINAIS E CONCLUSÕES</b>	<b>105</b>
	<b>REFERÊNCIAS</b>	<b>107</b>
	<b>APÊNDICES</b>	<b>110</b>
<b>A</b>	<b>Dados Experimentais: Compostos <math>6CB</math>, <math>7CB</math> e <math>8CB</math></b>	<b>111</b>
A.1	Composto $6CB$ . . . . .	111
A.2	Composto $7CB$ . . . . .	112
A.3	Composto $8CB$ . . . . .	113
<b>B</b>	<b>Propriedades Das Formas Fundamentais</b>	<b>115</b>
B.1	Pontos De Máximo E Mínimo . . . . .	115

B.2 Cálculo Das Formas Fundamentais I E II E Suas Propriedades Para Uma Superfície $z = f(x, y)$ . . . . .	117
--	-----

# Introdução

Nos últimos anos, uma grande quantidade de trabalhos publicados têm mostrado que diversos fenômenos macroscópicos relacionados ao universo podem ser estudados com o auxílio de amostras de matéria condensada; nesta linha, um Cristal Líquido se tornaria um “laboratório cosmológico”. Acredita-se que o aparecimento de defeitos topológicos seja resultado das várias transições de fase pelas quais o universo passou em seu início. O estudo de física de altas energias possui fatores limitantes relacionados, por exemplo, a energia em aceleradores de partículas. Estes fatores implicam na dificuldade de comprovações experimentais para modelos referentes ao surgimento de defeitos, portanto, a construção de modelos e o estudo de fenômenos equivalentes em matéria condensada tornou-se uma alternativa.

A possibilidade de se utilizar amostras de Cristais Líquidos para o estudo de fenômenos cosmológicos segue da observação de que determinadas simetrias e texturas apresentadas por esses compostos são análogas àquelas verificadas no universo [1, 5]. Testes para estudar a formação de defeitos foram propostos no trabalho de Kibble [6], no qual são discutidas possíveis quebras de simetrias na expansão do universo, levando também em consideração a formação de cordas cósmicas.

A conexão entre a teoria de Cristais Líquidos e do cosmos segue do fato de ambas poderem ser descritas pela mesma estrutura matemática e obedecerem equações análogas. Por exemplo, em meados da década de 1980 foi proposto que propriedades reológicas poderiam ser tratadas a partir de um modelo de transformação afim [7], na qual, propriedades de um cristal líquido poderiam ser tratadas a partir da deformação das moléculas de um líquido isotrópico, com simetria esférica, para moléculas com simetria elipsoidal. Esta idéia é análoga ao princípio da relatividade, o qual refere-se a equivalência entre qualquer referencial escolhido para a formulação das leis que descrevem o sistema físico. De maneira mais específica, pode-se sempre procurar uma descrição de um sistema físico a partir de uma transformação de coordenadas de um espaço curvo global para uma região que localmente se assemelha a um plano.

Dentro desse contexto, Simões et al. [8] mostraram que a anisotropia macroscópica de um meio nemático resultaria de uma transformação afim definida em termos locais, onde em cada ponto da amostra uma molécula esférica de um líquido isotrópico idealizado poderia ser “transformado” em uma molécula elipsoidal de um cristal líquido nemático. A imposição de um caráter local a transformação mostrou que a configuração da amostra determinada pela configuração do diretor adquiria uma curvatura intrínseca. Simões e Pazetti [9], em 2010, obtiveram uma equação para os cristais líquidos similar à equação de Einstein da gravitação. As analogias entre essas duas equações são as seguin-

tes: O tensor de deformação para uma mesofase líquido-cristalina seria equivalente ao tensor energia momento presente na equação da relatividade, enquanto que os termos dependentes da geometria da amostra assumem os papéis relacionados aos termos associados a geometria do espaço-tempo..

Os trabalhos de Zurek, Kibble, Simões et. al. motivam a seguinte questão: Para uma amostra nemática seria possível determinar as constantes elásticas a partir da curvatura do campo diretor considerando parâmetros puramente geométricos, isto é, sem levar em conta detalhes das interações moleculares? Responder a esta é a proposta da presente tese.

Este trabalho está dividido da seguinte forma. Inicia-se a discussão através de uma revisão dos conceitos necessários a abordagem proposta. Dessa forma, no Capítulo 1, serão apresentados os conceitos fundamentais a respeito dos cristais líquidos e das mesofases e na sequência, Capítulo 2, discute-se a física do contínuo na mesofase nemática, permitindo expressar e discutir a energia livre de Frank, grandeza proporcional a tensão de deformação de um cristal líquido.

Nos dois Capítulos intermediários, Capítulo 3 e Capítulo 4, apresenta-se e discute-se os conceitos de curvatura em curvas e superfícies e a sua generalização utilizando Tensores. Inicia-se a partir de uma definição informal e com o refinamento dos conceitos e métodos, se encerra a discussão no Capítulo 4 demonstrando o tensor de Riemann e do escalar de Ricci.

O tema deste trabalho é discutido no Capítulo 5. Nele será calculado o escalar de curvatura de uma amostra nemática com o vetor diretor dependente da posição e o resultado é comparado com a energia de Frank. Esse cálculo fornece a partir de parâmetros geométricos uma relação funcional entre as constantes elásticas. Essa relação é verificada a partir de uma análise utilizando um conjunto de dados experimentais, cujo resultados são apresentados no Apêndice A.

As conclusões e discussões finais, obtidas a partir das análises feitas após o registro gráfico do comportamento da relação funcional entre as constantes elásticas, são apresentadas logo após o Capítulo 5.

# Capítulo 1

## Introdução à Física dos Cristais Líquidos

Por muito tempo pensou-se que a matéria apresentava-se em apenas três estados físicos, o sólido, o líquido e o gasoso, sendo essa idéia reforçada pelas experiências diárias, reconhecendo-se facilmente um composto qualquer estando em uma desses estados, como por exemplo a água e o gelo [11, 12]. Entretanto, em 1888, o botânico austríaco *Reinitzer* notou, ao investigar esteres de colesterol, que esses compostos orgânicos ao sofrerem uma mudança de fase do estado líquido para o sólido apresentavam dois pontos de fusão, e não mudavam de fase de maneira ordinária. Em seu estudo, a  $145,5^{\circ}\text{C}$ , o benzoato de colesterila fundia tornando-se um líquido com aspecto turvo e a  $178,5^{\circ}\text{C}$  tornava-se um líquido claro. Um outro comportamento não comum foi detetado ao se resfriar as amostras. Primeiramente o líquido claro apresentava um azul pálido antes de se tornar turvo e um azul violeta brilhante quando a amostra solidificava-se. *Reinitzer* então enviou suas amostras para o físico alemão *Lehmann*.

*Lehmann* trabalhava com cristalização de vários compostos e ao receber as amostras enviadas por *Reinitzer*, observou com o auxílio de um microscópio de polarização que esses compostos possuíam propriedades similares com algumas de suas próprias amostras. Esses compostos apresentavam fluidez, assim como os líquidos, e também propriedades óticas como as apresentadas pelos sólidos cristalinos [11].

Estudos subsequentes demonstraram que essa fase intermediária observada era um novo estado da matéria, no qual tanto as propriedades mecânicas, quanto as propriedades de simetria são intermediárias entre o estado sólido e o estado líquido [11, 13]. Primeiramente *Lehmann* referiu-se a essa mesofase<sup>a</sup>, ou fases mesomórficas, como *cristais fluindo*. Mais tarde ele criou o termo *Cristais Líquidos*.

A diferença macroscópica fundamental entre o estado sólido e o líquido diz respeito a sua fluidez. O líquido flui com facilidade e assume a forma do recipiente que o contém, o sólido, ao contrário, não flui e possui uma forma fixa.

Os sólidos cristalinos possuem um arranjo periódico formado por moléculas, ou grupo de moléculas (blocos constituintes), de tal forma que o cristal pode ser descrito em termos de uma grade, na qual os blocos estão ligados a cada ponto da rede (Fig.1.1) e o centro de gravidade de vários grupos são localizados em uma grade. Como

---

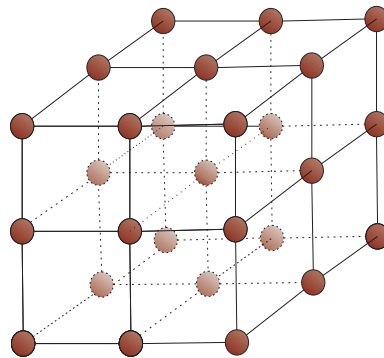
<sup>a</sup>Mesos = meio e morphe = forma

em um cristal as moléculas ocupam um espaço específico, existe uma ordem posicional e orientacional o que possibilita definir uma direção para a molécula.

Mais fundamentalmente, pode-se definir um cristal em relação ao padrão primitivo, isto é, a base. Se em um dado ponto  $X_0$  localiza um ponto na rede, então um segundo ponto [15] é encontrado considerando-se vetores de translação fundamentais:

$$X = X_0 + n_1A_1 + n_2A_2 + n_3A_3 \quad (1.1)$$

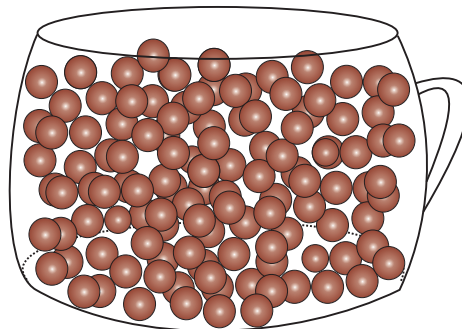
em que os  $n_i$  são inteiros e os  $A_i$  são os vetores de base ( $i = 1, 2, 3$ ).



**Figura 1.1** – Estrutura cristalina na qual tem-se a rede (as linhas do cubo) e a base (os átomos constituintes, representados pelos círculos nos vértices).

Sólidos cristalinos podem apresentar a propriedade de birrefringência. Ao se incidir luz sobre um material com uma determinada anisotropia, se deteta diferentes índices de refração para direções de polarização. [12, 11].

Diferentemente dos sólidos, os líquidos escoam por não resistirem a tensões tangenciais. Como em um composto na fase líquida não há a formação de grades (Fig. 1.2), as moléculas de um líquido se propagam de maneira aleatória e as orientações dos eixos são freneticamente desorientadas. Um líquido é definido de maneira similar a um sólido somente se for considerada uma densidade média de partículas ao invés de uma única molécula [12].



**Figura 1.2** – Representação de um líquido com moléculas esféricas. A simetria esférica diz respeito a simetria do potencial de interação entre as moléculas.

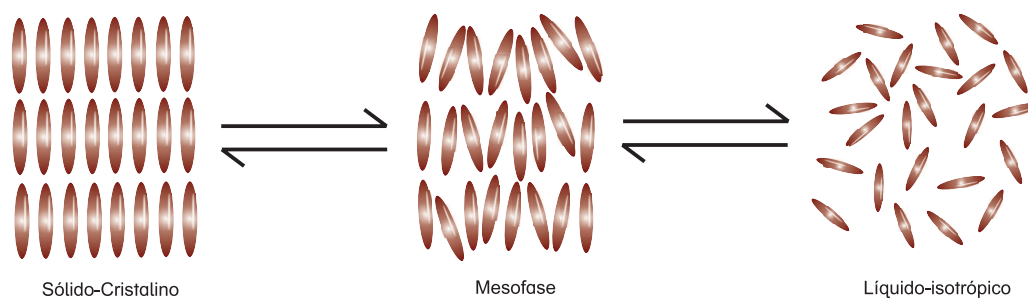
As mesofases possuem propriedades intermediárias a essas duas fases, como por exemplo; a fluidez e a birrefringência. Desse modo, pode-se defini-las como sistemas nos quais a ordem é semelhante a um líquido mas existe algum grau de anisotropia (como por exemplo no alinhamento molecular) em pelo menos uma direção. Assim como nos sólidos cristalinos, essas características anisotrópicas são evidenciadas por difração de Raio-X.

## 1.1 Classificação dos Cristais Líquidos

Os cristais líquidos podem apresentar diversas mesofases e alguns compostos podem apresentar mais de uma no intervalo entre as fases líquido-isotrópico e sólido-cristalina<sup>b</sup>. Detalhes referentes a orientação e ao grau de anisotropia geométrica das moléculas constituintes, ou seja, detalhes a respeito da forma, diferenciam as várias mesofases existentes. Os parâmetros que levam às mudanças de fases trazem informações sobre o tipo do cristal líquido. Nas próximas seções se apresenta uma breve descrição da classificação dos cristais líquidos. [11, 13].

### 1.1.1 Cristais Líquidos Termotrópicos

Os cristais líquidos termotrópicos são compostos, em geral orgânicos, que apresentam mesofases basicamente devido a variação da temperatura, Figura (1.3). De maneira ampla, as moléculas que constituem um termotrópico são aproximadas por moléculas anisométricas, ou seja, com algum grau de anisotropia geométrica.



**Figura 1.3** – Representação pictórica para a transição de fase líquida isotrópica/sólido cristalina com o aparecimento de uma mesofase para sistemas termotrópicos com moléculas calamíticas. A transição para uma mesofase depende do aumento ou da diminuição da temperatura, representada pelas linhas direcionadas no sentido da mudança de temperatura.

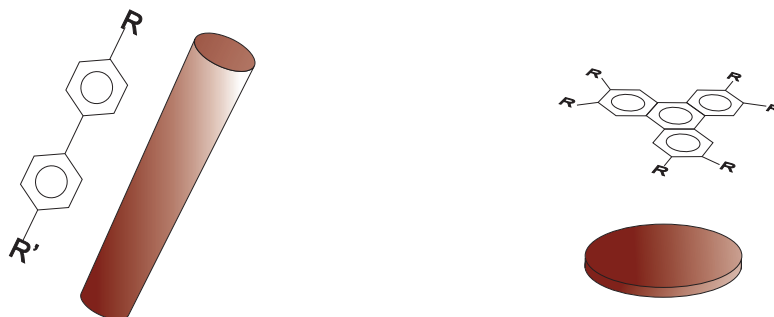
A geometria das moléculas constituintes de um termotrópico podem ser aproximadas por elipsoides oblatos, lembrando um grão de arroz, ou elipsoides prolatos<sup>c</sup>

<sup>b</sup>Cristais líquidos que apresentam mais de uma mesofase entre a fase sólida e líquida são chamados de polimórficos.

<sup>c</sup>Moléculas com geometria elipsoidal oblata são conhecidas por calamíticas e as com forma de disco simplesmente são chamadas de discóticas.

(forma de disco). As moléculas discóticas apresentam centros com anéis aromáticos adjacentes em uma configuração planar. Já as calamíticas possuem um arranjo preferencial em relação a uma direção espacial, Figura (1.4).

O alto grau de anisotropia na geometria da forma molecular é responsável pelas mesofases que este tipo de cristal líquido irá apresentar.

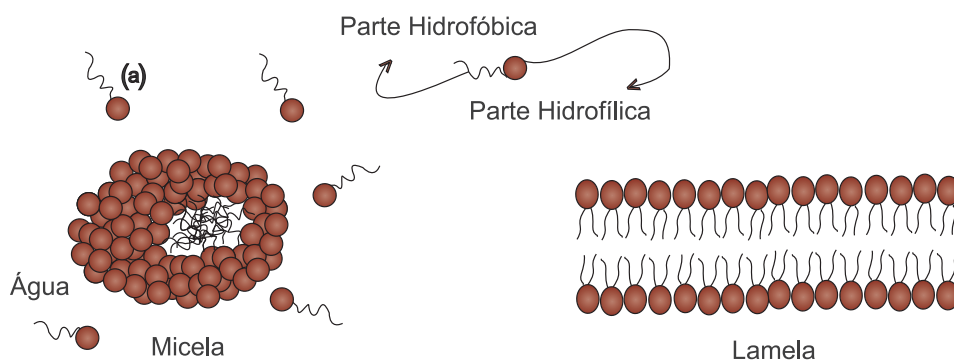


**Figura 1.4** – Fórmula orgânica e geometria das moléculas calamíticas e discóticas.

Os cristais líquidos termotrópicos possuem relevância não somente em pesquisas básicas mas também no desenvolvimento de tecnológicas, como por exemplo, tela de monitores [14]

### 1.1.2 Cristais Líquidos Liotrópicos

Os compostos classificados como liotrópicos, Figura (1.5), são formados por duas ou mais componentes, e dependem da concentração do solvente para apresentar mesofases. Geralmente, uma das componentes é uma espécie química composta por moléculas que possuem em sua estrutura uma parte polar e hidrofílica, que atrai a água, e uma segunda parte é hidrofóbica<sup>d</sup>, ou seja, repele a água. A outra componente, o solvente, em geral é a água.

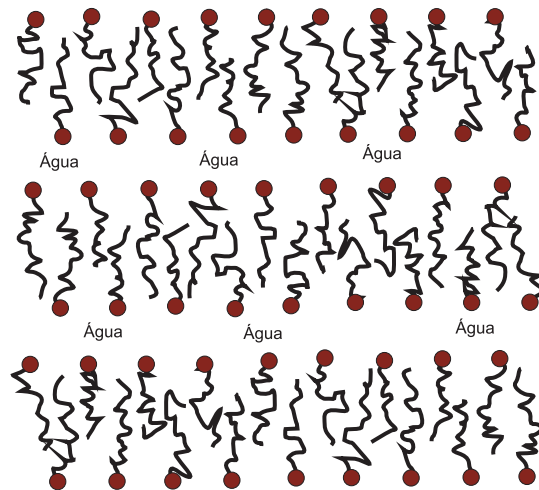


**Figura 1.5** – Representação de estruturas formadas por liotrópicos, como lamelas e micelas, dependendo da concentração. A Molécula anfifílica está representada pela letra (a) na figura.

<sup>d</sup>Espécies químicas que apresentam estruturas com duas partes, uma hidrofóbica e outra hidrofílica são conhecidos por moléculas anfifílicas

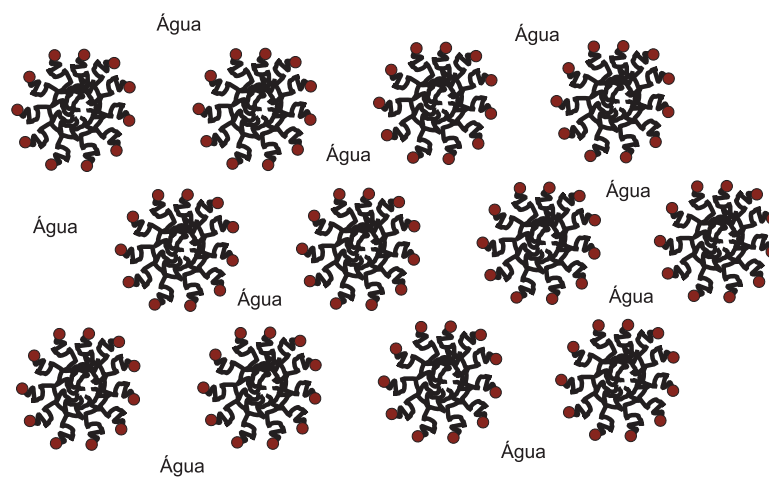
Em 1857, utilizando um microscópio de polarização, o oftalmologista Mettenheimer extraiu dos nervos uma substância macia que havia sido identificada por Virchow, em 1850. Essa substância, classificada hoje como um cristal líquido liotrópico, têm estruturas tubulares com uma interface de água entre *bainhas*. A conhecida bainha de mielina é uma ma membrana que protege os neurônios e nervos.

Outro exemplo é o sistema formado por sabonete e água Figura.(1.6).



**Figura 1.6** – Representação da fase pura do sabão, ou lamelar, em que as moléculas se estruturam repelindo a água através de sua parte hidrofóbica. Imagem adaptada de [13]

Após um tempo em contato com a água, aparece um mistura com um aspecto diferente (normalmente em tom branco) que é uma mesofase liotrópica Figura (1.7).



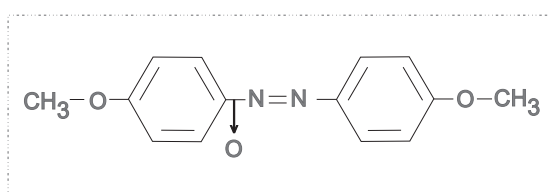
**Figura 1.7** – Fase hexagonal do sabão, mesofase liotrópica.

A variação de concentração e temperatura de compostos liotrópicos levam a formação de estruturas como micelas e lamelas, representadas na Figura (1.5) e tubulares.

## 1.2 Classificação das Mesofases

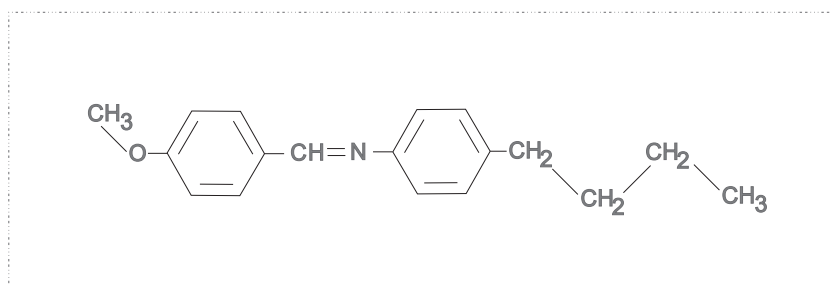
Georges Friedel foi o primeiro a entender e a propor que os cristais líquidos são fases intermediárias da matéria, classificando-as basicamente em três divisões: Fase Nemática, Colestérica e Esmética.

As mesofases pelas quais podem passar um cristal líquido dependem dos detalhes estruturais desses compostos mesogênicos<sup>e</sup>[13]. O exemplo mais comum na literatura é de moléculas calamíticas de compostos termotrópicos como, por exemplo, o PAA, representado pela Figura (1.8).



**Figura 1.8** – Representação da estrutura química da molécula de PAA.

Outro exemplo é a molécula de MBBA (4-4'-metoxibenzilideno-butilanilina), com a estrutura química representada pela Fig.(1.9):



**Figura 1.9** – Representação da estrutura química da molécula de MBBA.

Compostos como o MBBA e o PAA, podem apresentar durante um transição de fase mais do que uma mesofase, o que implica em um comportamento polimórfico. Entretanto, ao contrário dos cristais líquidos liotrópicos, o número de fases nemáticas apresentadas pelos termotrópicos é menor [13].

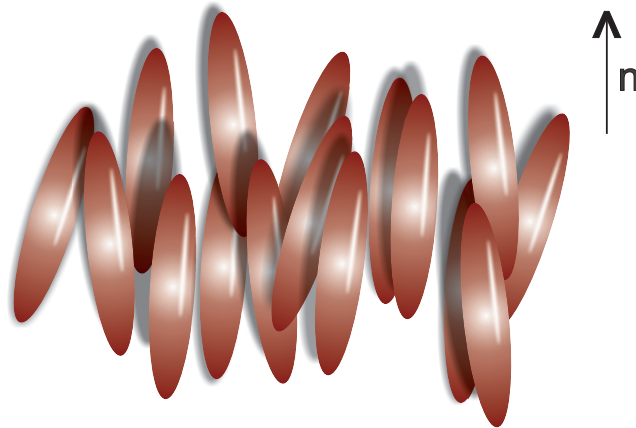
A estrutura geométrica dos grãos é fixa em cristais líquidos termotrópicos, o que leva a um ordenamento dependente das condições da temperatura, enquanto que os liotrópicos possuem mesofases dependendo da concentração assim como da temperatura.

<sup>e</sup>Compostos que exibem as mesofases são também chamados de mesogênicos.

### 1.2.1 Mesofase Nemática

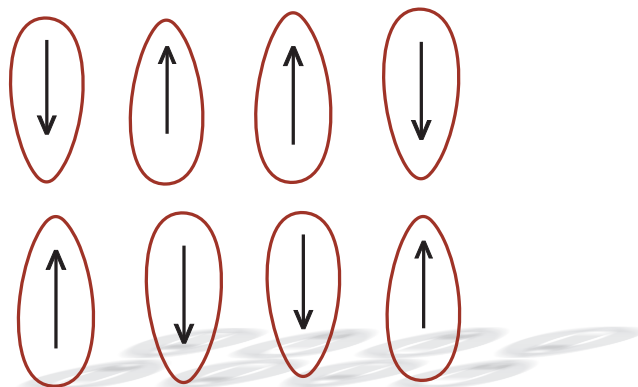
Na mesofase nemática as moléculas mantêm uma direção média preferencial em toda a amostra, implicando em um alto grau de ordem orientacional, mas sem correlação entre os centros de massa. A não correlação implica em três graus de liberdade para a molécula constituinte, resultando em uma distribuição espacial homogênea [11, 12].

As mesofases nemáticas podem ser classificadas em uniaxial e biaxial. Na primeira existe uma simetria completa em torno de um eixo médio de orientação, denominado diretor ( $\mathbf{n}$ ), o qual descreve, para cada ponto da amostra, o eixo preferencial de alinhamento médio das moléculas. Na biaxial existem três eixos de simetria ortogonais dois a dois, Figura (1.12).



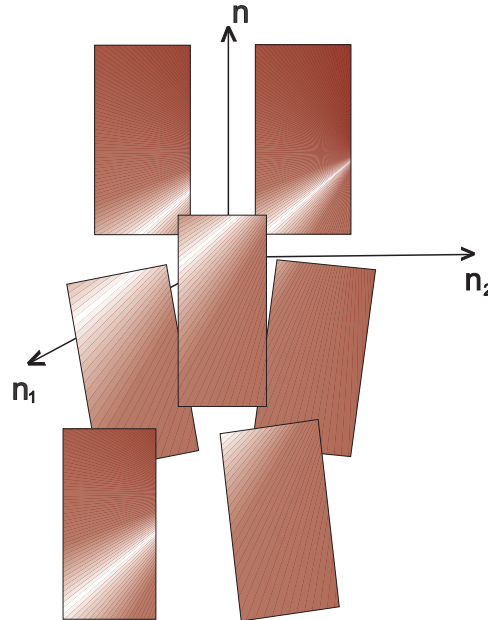
**Figura 1.10** – Representação pictórica da orientação preferencial de moléculas calamíticas. A direção média é fornecida pelo vetor diretor  $\mathbf{n}$ .

A simetria da mesofase uniaxial [12] implica que a orientação do vetor diretor,  $\mathbf{n}$ , é indistinguível pela mudança de direção  $-\mathbf{n}$ . Cristais líquidos nemáticos são apolares, portanto, se moléculas individuais possuem momentos de dipolo elétrico permanente, elas se orientarão de tal maneira que esses momentos se anulem Fig.(1.11).



**Figura 1.11** – Representação de um nemático, em que as setas fornecem as orientações individuais dos dipolos de cada molécula, que são indistinguíveis.

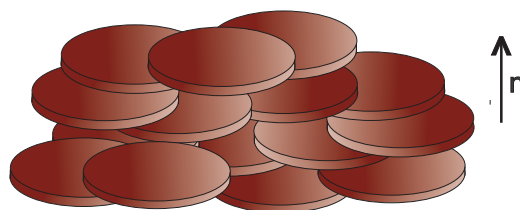
A mesofase biaxial possui grãos constituintes que podem ser aproximados por retângulos, assemelhando-se a *caixinhas*, como representado na Figura (1.12). Uma observação importante, é que podem existir fases uniaxiais com moléculas biaxiais.



**Figura 1.12** – Representação para um nemático biaxial. Os eixos representam o diretor principal  $\mathbf{n}$ , e os secundário  $\mathbf{n}_1$  e  $\mathbf{n}_2$ . Isso possibilita a visualização da simetria dois a dois. Imagem adaptada de [12].

As duas mesofases, uniaxial e biaxial, diferem quanto a refração da luz. Na mesofase uniaxial, o alinhamento bem definido dá origem a uma anisotropia ótica, ou seja, se a luz incidente for polarizada na direção do vetor diretor (paralela), o índice de refração terá um valor e se a luz for polarizada perpendicularmente, o índice de refração será diferente. Conseqüentemente, existirão dois índices de refração. No nemático biaxial, como os eixos estão dois a dois, existirão três índices de refração.

Uma outra simetria geométrica [13] foi identificada em 1977, quando se observou uma mesofase em que as moléculas possuíam forma discótica. Essa mesofase não possui uma translação de longo alcance, organizando-se em arranjos orientacionais como representado pela Figura 1.13.



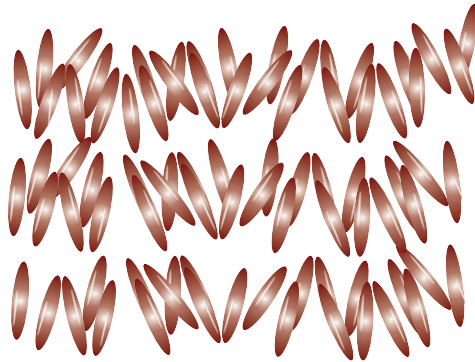
**Figura 1.13** – Representação pictórica para a mesofase nemática discótica. Adaptada de [13].

## 1.2.2 Mesofase Esmética

As fases esméticas possuem configurações estratificadas, ou seja, em camadas, e a classificação é feita em relação ao arranjo molecular dentro dessas camadas.

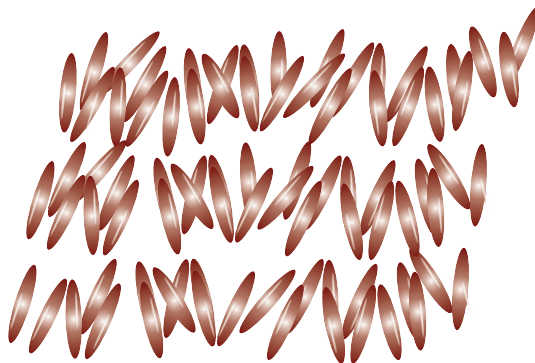
Os grãos constituintes em geral não se movem entre uma camada e outra, resultando em uma ordem posicional de longo alcance perpendicular ao plano das camadas [12, 13].

O esmético A,  $S_A$ , possui moléculas orientadas verticalmente em relação as estratificações, ou seja, paralelas a direção normal em relação as camadas, o que implica que na mesofase  $S_A$  as moléculas não possuem ordem posicional. As distâncias entre camadas tendem a se manter fixas e bem definidas, interagindo fracamente quando comparadas com a força lateral entre as moléculas, o que implica em um deslizamento das estratificações umas sobre as outras de maneira relativamente fácil, escoando como um líquido.



**Figura 1.14** – Representação da mesofase esmética A, com as moléculas orientadas na média na direção normal ao plano das camadas.

O  $S_C$  possui a mesma formação estrutural que o  $S_A$ , entretanto, as moléculas possuem uma inclinação em relação a direção normal, como mostra a Fig.(1.15).

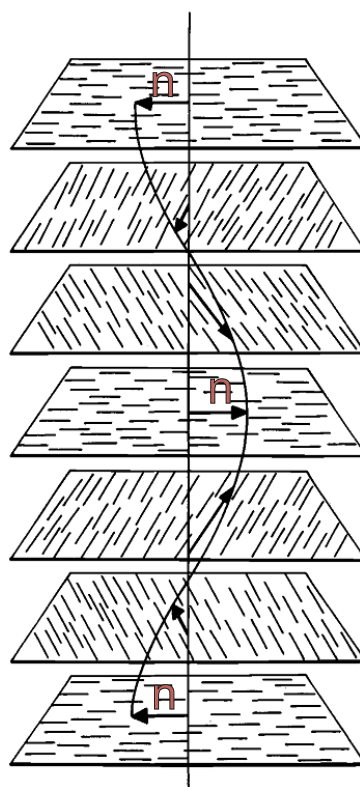


**Figura 1.15** – Representação pictórica para a fase esmética C, no qual pode-se perceber que as moléculas são inclinadas em relação a normal ao plano das.

Existem ainda formas polimórficas dos eméticos A e C, como:  $S_B$ ,  $S_E$ ,  $S_G$  e  $S_H$ , entre outros [13].

### 1.2.3 Mesofase Colestérica

A mesofase colestérica é composta por moléculas opticamente ativas, de modo que o composto adquire uma torção espontânea em relação ao eixo normal à direção preferencial de alinhamento das moléculas. Contudo, misturas não racêmicas também podem produzir torções. A mesofase colestérica pode ocorrer quando existe uma mistura não racêmica<sup>f</sup> de dois compostos, pois, dois enantiômeros (um espelho do outro) misturados em proporções iguais (mistura racêmica), não desviam o plano da luz polarizada, o que evidencia a ausência de torção.



**Figura 1.16** – Estrutura helicoidal de um colestérico. Pode-se perceber a orientação média das moléculas, dada pelo vetor diretor girando em relação a direção perpendicular a  $\mathbf{n}$ . Imagem adaptada de [13].

Ao se dispersar em um composto nemático uma molécula quirais, isto é, uma estrutura que não se sobrepõem à sua imagem especular, será formada uma distorção helicoidal, podendo se apresentar tanto no sentido dextrogiro ou levogiro dependendo da conformação molecular da amostra, de modo que uma mesofase colestérica também é um tipo de nemático.

Quando as moléculas são opticamente inativas ou a mistura de moléculas quirais não produzem torção, então a estrutura irá corresponder ao verdadeiro nemático.

<sup>f</sup>Duas moléculas quando misturadas em proporções iguais de dois enantiômeros, diz-se mistura racêmica.

## Capítulo 2

# Introdução à Teoria do Contínuo nas Mesofases Nemáticas

### 2.1 Parâmetro de Ordem

O parâmetro de ordem quantifica o quanto uma mesofase ou fase de um cristal líquido está ordenada. Desse modo, para a fase mais simétrica (mais ordenada), o parâmetro de ordem deverá ser nulo, enquanto que na menos simétrica não deverá ser nulo. Pode-se exemplificar essa diferença considerando a mesofase nemática, na qual existe um alinhamento médio das moléculas, e a fase líquida cristalina, na qual não existe um alinhamento preferencial implicando em um estado mais simétrico que a nemática.

A partir de simetrias das transições de fase/mesofase, o parâmetro de ordem pode ser uma quantidade escalar, como por exemplo na transição líquido vapor, uma quantidade vetorial (transições ferromagnéticas) ou, um tensor. Esse último é de maior interesse visto que na transição líquido-nemático a quantidade devido as simetrias é descrita tensorialmente.

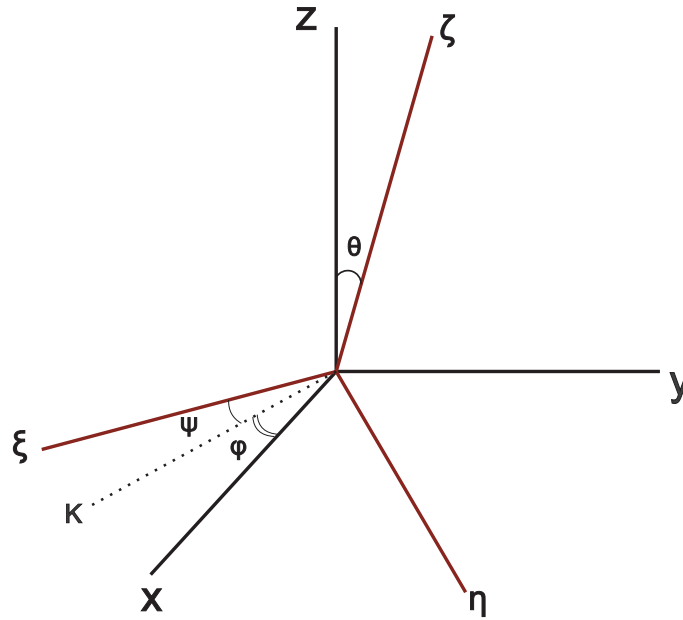
Nessa seção serão apresentados duas abordagens para definir o parâmetro de ordem de um cristal líquido nemático uniaxial. Primeiramente será definido o parâmetro de ordem microscópico, que descreve o alinhamento das moléculas calamíticas, Subseção 2.1.1, e na sequência o macroscópico, Subseção 2.1.2, o qual pode ser definido a partir de propriedades macroscópicas anisotrópicas [12, 11, 18, 19].

#### 2.1.1 Aproximação Microscópica

A geometria mais simples das moléculas constituintes de um composto que permite mesofases nemáticas é a elipsoidal. Desse modo, considere uma amostra nemática uniaxial constituída por moléculas calamíticas rígidas. Introduz-se um sistema referencial de laboratório dado pelas coordenadas  $x$ ,  $y$  e  $z$  e, para se especificar a orientação das moléculas em relação ao sistema de laboratório, Figura 2.1, pode se introduzir um sistema fixado na molécula descrito pelas coordenadas  $\xi$ ,  $\eta$  e  $\zeta$ . A direção do diretor é escolhida como coincidindo com a direção  $z$  do laboratório [18].

Considerando a coordenada  $\zeta$  coincidindo com o semi-eixo maior da molécula, a orientação pode ser completamente determinada pelos ângulos de Euler. O

primeiro,  $\theta$ , está entre os eixos coordenados  $z$  e  $\zeta$ . O segundo,  $\psi$ , está entre o eixo  $\xi$  e a normal ao plano,  $\kappa$ , formado pelos eixos  $z$  e  $\zeta$  e que descreve uma rotação em torno do eixo normal. O terceiro ângulo de Euler,  $\phi$ , descreve uma rotação em torno do vetor diretor e é o ângulo entre o eixo  $x$  e a normal ao plano  $z - \zeta$ , Figura 2.1.



**Figura 2.1** – Representação dos sistemas de coordenadas do laboratório  $(x, y, z)$  e fixo na molécula  $(\xi, \eta, \zeta)$  e, os ângulos de Euler  $\phi, \psi$  entre a normal ao plano  $z - \zeta$  e os eixos  $\eta$  e  $x$  respectivamente e  $\theta$ . Figura adaptada de [18].

Em uma mesofase nemática é esperado que a dependência em relação ao ângulo  $\psi$  seja fraca, enquanto que a distribuição deve ser fortemente dependente da direção  $\theta$ , relacionada a orientação do diretor. Pode-se enumerar as seguintes características:

1. Da condição de simetria em torno do diretor:  $\omega(\theta, \psi)$  é independente de  $\phi$ .
2. Não há distinção em uma rotação na direção do diretor:  $\omega(\theta, \psi) = \omega(\pi - \theta, \psi)$ .

A condição 1 diz respeito a simetria completa em torno do diretor, enquanto que a condição 2 esta relacionada a equivalência entre as orientações do diretor,  $\mathbf{n}$  e  $-\mathbf{n}$ , isto é, refere-se ao fato de cristais líquidos nemáticos serem apolares, brevemente discutido na Seção 1.2.1.

A orientação média das moléculas pode ser então calculada associando-se uma função distribuição,  $\omega(\theta, \psi)$ , de uma fração de moléculas em um intervalo  $\theta + d\theta$  e  $\psi + d\psi$ , de tal forma que [12, 18];

$$\langle X \rangle = \int_0^\pi d\theta \int_0^{2\pi} d\psi X \omega(\theta, \psi) \sin \theta \quad (2.1)$$

A equação anterior fornecerá um valor nulo para  $\langle X \rangle$  quando  $\omega(\theta, \psi)$  é substituído por  $\omega(\pi - \theta, \psi)$ . Na prática, o parâmetro de ordem leva em consideração a

orientação média de  $\zeta$  em relação ao diretor, e não se trabalha com a distribuição completa. Considerando a componente  $\zeta_z$  em relação ao diretor pode-se calcular:

$$\langle \zeta_z \rangle = \langle \cos \theta \rangle = 0 \quad (2.2)$$

o que no entanto é nulo. Desse modo, o parâmetro de ordem pode ser definido a partir da próxima escolha [12, 18]:

$$S = \frac{1}{2} \langle 3\zeta_z^2 - 1 \rangle = \frac{1}{2} \langle 3 \cos^2 \theta - 1 \rangle \quad (2.3)$$

A partir da Eq. (2.3) o parâmetro de ordem fornece o valor  $S = 0$  quando a distribuição é aleatória, Para um alinhamento totalmente paralelo ( $S = 1$ ), ou seja, máximo, quando  $\theta = 0$  e  $\theta = \pi$ . Para  $\theta = \pi/2$  o alinhamento é perpendicular e valor para parâmetro de ordem  $S = -1/2$ .

O modelo para o parâmetro de ordem foi construído considerando uma forma específica para a molécula de cristal líquido, entretanto, pode-se generalizar a expressão Eq. (2.3) de tal forma a se considerar formas geométricas arbitrárias.

Considerando novamente vetores fixados na molécula e sendo esses unitários e ortogonais, pode-se rotular esse sistema como  $\xi$ ,  $\eta$  e  $\zeta$ , do mesmo modo feito anteriormente. Desse modo, a expressão para o parâmetro de ordem a partir das quantidades [12]:

$$S_{ij}^{\alpha\beta} = \frac{1}{2} \langle 3i_\alpha j_\beta - \delta_{\alpha\beta} \delta_{ij} \rangle \quad (2.4)$$

em que  $\alpha$  e  $\beta$  assumem os valores (1, 2, 3), representando as coordenadas do referencial do laboratório ( $x, y, z$ ) e  $i$  e  $j$  os valores  $\xi, \eta$  e  $\zeta$  [12, 18].

A equação generalizada para o parâmetro de ordem microscópico, em relação ao pares de índices, é simétrica e ainda possui o traço nulo;

$$S_{ij}^{\alpha\alpha} = 0 \quad e \quad S_{ii}^{\alpha\beta} = 0$$

Um tensor com traço nulo deve possuir ao menos um de seus autovalores diferentes, o que irá implicar em alguma anisotropia, portanto, essa propriedade do tensor parâmetro de ordem era esperado.

## 2.1.2 Aproximação Macroscópica

A diferença entre a fase líquida isotrópica e a mesofase nemática é evidenciada pelas propriedades tensoriais macroscópicas, as quais são anisotrópicas em uma mesofase nemática. Por exemplo; a suscetibilidade magnética, a permeabilidade elétrica, entre outras. Desse modo, é possível utilizar qualquer uma dessas propriedades para

definir um parâmetro de ordem macroscópico [18, 12].

A relação entre indução magnética  $\mathbf{B}$  e o campo  $\mathbf{H}$  pode ser escrita na forma:

$$\mathbf{M} = \mathbf{B} - \mathbf{H}$$

em que  $\mathbf{M}$  é a magnetização. O resultado anterior está expresso em *cgs*, no qual a permeabilidade no vácuo é  $\mu_0 = 1$  [18]. Dividindo essa expressão por  $\mathbf{B}$ , pode-se escrever;

$$\chi = \mathbf{M}/\mathbf{B} \rightarrow \mathbf{M} = \chi\mathbf{B}$$

Para se descrever a anisotropia da fase é necessário considerar a magnetização de maneira tensorial [12, 18], assim:

$$\mathbf{M}_i = \chi_{ij}\mathbf{B}_j \quad (2.5)$$

no qual os índices assumem:  $i, j = x, y, z$ .

Para a situação na qual o campo é estático, o tensor  $\chi_{ij}$  é simétrico no par de índices. Desse modo, considerando um líquido isotrópico a suscetibilidade pode ser simplesmente escrita como:

$$\chi_{ij} = \chi\delta_{ij}$$

Para uma fase nemática uniaxial o tensor terá dois dos autovalores relacionados as componentes paralelas do diretor e um relacionado a componente perpendicular. Desse modo:

$$\chi_{ij} = \begin{vmatrix} \chi_{\parallel} & 0 & 0 \\ 0 & \chi_{\parallel} & 0 \\ 0 & 0 & \chi_{\perp} \end{vmatrix}$$

O tensor parâmetro de ordem deve se anular em uma fase isotrópica, devido a diferença de simetrias. Isso é feito extraíndo-se a parte anisotrópica do tensor  $Q_{\alpha\beta}$  da suscetibilidade magnética [12, 18]:. Dessa forma, escreve-se:

$$Q_{ij} = G \left( \chi_{ij} - \frac{1}{3}\delta_{ij} \sum_k \chi_{kk} \right) \quad (2.6)$$

em que o tensor  $Q_{\alpha\beta}$  é simétrico, real, de traço nulo e é chamado de tensor parâmetro de ordem e  $G$  pode ser escrita como  $Q_0$ , na qual é a constante de normalização e pode ser escolhida como o máximo da anisotropia observável. Essa definição abrange uma classe ampla de cristais líquidos, além de simples nemáticos.

Escolhendo de maneira apropriada os eixos  $i, j$ , pode-se diagonalizar o

tensor parâmetro de ordem, em que a estrutura mais geral encontrada será descrita pela matriz;

$$Q_{ij} = \begin{vmatrix} Q_1 & 0 & 0 \\ 0 & Q_2 & 0 \\ 0 & 0 & (-Q_1 + Q_2) \end{vmatrix},$$

em que essa estrutura é correspondente a um cristal líquido nemático biaxial. Contudo, para mesofases nemáticas uniaxiais, a relação anterior simplifica-se, o parâmetro de ordem do cristal líquido nemático será [12, 18]:

$$Q_{ij} = \begin{vmatrix} \frac{1}{3}(\chi_{\perp} - \chi_{\parallel}) & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{3}(\chi_{\perp} - \chi_{\parallel}) & 0 \\ 0 & 0 & \frac{2}{3}(\chi_{\parallel} - \chi_{\perp}) \end{vmatrix}$$

### 2.1.3 A Relação entre os Parâmetros de Ordem Macroscópico e Microscópico

Considerando a aproximação que as moléculas da amostra de cristal líquido são rígidas, é possível fazer a conexão entre os parâmetros de ordem macroscópico e microscópico.

Uma forma de encontrar essa relação é partir novamente da suscetibilidade magnética. A conexão pode ser estabelecida considerando-se a anisotropia diamagnética [12];

$$\chi_{\alpha} = \chi_{\parallel} - \chi_{\perp} \propto S \quad (2.7)$$

no qual a diferença de anisotropia perpendicular e paralela é proporcional ao parâmetro de ordem microscópico  $S$ . A constante de proporção pode ser substituída por  $(A_{\parallel} - A_{\perp})$ , em que  $A$  é a polarização magnética. Dessa forma:

$$\chi_{\alpha} = \chi_{\parallel} - \chi_{\perp} = c(A_{\parallel} - A_{\perp})S \quad (2.8)$$

A relação entre as anisotropias macroscópicas e microscópicas pode então ser dadas pela relação [12, 18]:

$$\langle Q_{ij}(\hat{n}) \rangle = S Q_{ij}(n) \quad (2.9)$$

em que  $\hat{n}$  representa uma quantidade microscópica e  $n$  uma quantidade macroscópica, ou seja, o diretor para um molécula e a direção média medida macroscopicamente.

## 2.2 Energia de Deformação

Considerando uma amostra nemática uniaxial orientada, é possível ter uma orientação média não uniforme durante toda a amostra devido fatores como; impurezas, condições de fronteira relacionadas a superfície de contato e campo externo. Impondo condições de contorno, existirá alguma deformação na amostra, isto é, o campo diretor deverá se deformar.

Frank (1958), referiu-se aos torques restauradores que se opõem as mudanças em um cristal líquido assumindo a lei de Hooke como sendo proporcional ao tensão de deformação. Isso é equivalente a assumir que a energia livre é proporcional a tensão de deformação. Do ponto de vista teórico, essas deformações podem ser descritas a partir de uma descrição do contínuo, análoga a teoria elástica clássica [18, 31].

Para encontrar a expressão para a energia livre de Frank, considere que em cada ponto da amostra a direção preferencial é dada pelo diretor  $\mathbf{n}(\mathbf{r})$ . A descrição da deformação da amostra deve levar em consideração uma variação lenta do vetor diretor, em escalar molecular, em função da posição [11–13, 15–18]. Essa condição pode ser expressa matematicamente por:

$$\mathbf{a}\nabla\mathbf{n} \ll 1 \quad (2.10)$$

As componentes para as deformações podem ser escritas como:

$$\frac{\partial n_x}{\partial x}, \frac{\partial n_y}{\partial y}, \frac{-\partial n_y}{\partial x}, \frac{\partial n_x}{\partial y}, \frac{\partial n_x}{\partial z}, \frac{\partial n_y}{\partial z}$$

Ao se assumir que a energia livre é uma função quadrática da tensão de deformação, torna-se conveniente considerar também os termos de segunda ordem para as derivadas do diretor [11, 12].

Desconsiderando-se efeitos elétricos de longo alcance e considerando somente interações de curto alcance entre as moléculas e, rotulando então  $F_d$  de energia livre devido a distorção do diretor, impõe-se algumas condições sobre a energia livre [12]:

A energia de deformação,  $F_d$ , deve ser par em  $\mathbf{n}$ . Essa condição refere-se ao fato do diretor ser indistinguível por uma rotação de  $\pi$ , ou seja,  $(\mathbf{n})$  e  $(-\mathbf{n})$  são equivalentes. Somente os termos invariantes sobre rotação serão considerados, visto que não existe termos lineares em  $\nabla\mathbf{n}$ . O primeiro termo,  $\nabla\cdot\mathbf{n}$ , é excluído pela primeira condição e  $\mathbf{n}\cdot\nabla\times\mathbf{n}$ , muda de sinal nas transformações:

$$x \rightarrow -x, \quad y \rightarrow -y \quad e \quad z \rightarrow -z$$

observando que esse termo não deve aparecer em um material com simetria central.

A terceira imposição diz respeito a não necessidade dos termos que possuem a forma de  $\nabla\cdot\mathbf{u}$ , em que  $\mathbf{u}(\mathbf{r})$  é um campo vetorial arbitrário. Esses termos podem

ser descartados devido a identidade [12]:

$$\int \nabla \mathbf{u} \cdot d\mathbf{r} = \int d\sigma \cdot \mathbf{u} \quad (2.11)$$

em que  $\int d\sigma$  é a representação para a integral de superfície e  $d\sigma$  tem sua direção normal a superfície, em todos os pontos. Essa condição remete ao fato de se considerar apenas o *Bulk* da amostra, ou seja, se assume uma configuração planar e os termos de contorno são desconsiderados.

Para construir a energia de deformação  $F_d$ , considera-se as derivadas espaciais, explicitamente, do diretor: Elas irão formar um tensor de ordem 2,  $\partial_\alpha n_\beta$ . Separando o tensor em uma parte simétrica;

$$e_{\alpha\beta} = \frac{1}{2} (\partial_\alpha n_\beta + \partial_\beta n_\alpha) \quad (2.12)$$

e em uma parte antissimétrica,

$$(\nabla \times \mathbf{n})_z = (\partial_x n_y - \partial_y n_x) \quad (2.13)$$

e os demais termos do rotacional.

Uma maneira conveniente para expressar esse tensor é considerar um sistema referencial ortogonal com o eixo  $z$  paralelo ao diretor. A partir dessa consideração, os gradientes na componente  $z$  de  $\mathbf{n}$  desaparecem [12]:

$$0 = \nabla (n_z^2 + n_x^2 + n_y^2) = 2n_z \nabla_z + 0 = 2\nabla n_z$$

consequentemente:

$$e_{zz} = 0 \quad (2.14)$$

$$e_{zx} = \frac{1}{2} (\nabla \times \mathbf{n})_y \quad (2.15)$$

$$e_{zy} = -\frac{1}{2} (\nabla \times \mathbf{n})_x \quad (2.16)$$

Considerando a propriedade de paridade para a energia, a função procurada deve ser uma quadrática das componentes do tensor e do rotacional de  $\mathbf{n}$ . Assim é conveniente separar as contribuições:

$$F_d = F_e + F_c + F_{ec} \quad (2.17)$$

em que  $F_e$  vem dos termos quadráticos no tensor  $e_{\alpha\beta}$ ,  $F_c$  são as contribuições dos termos no rotacional do diretor e  $F_{ec}$  são os termos cruzados [12].

Para escrever a energia de deformação de um cristal líquido é necessário

conhecer cada uma das contribuições. Desse modo, começando com a contribuição dos termos quadráticos no tensor  $e_{\alpha\beta}$ :

Encontrar o número de termos para a contribuição  $F_e$  é equivalente a encontrar o número de constantes elásticas em um meio de simetria  $C_\infty$  ao redor do eixo  $z$ . A forma mais geral é dada por [12]:

$$F_e = \lambda_1 e_{zz}^2 + \lambda_2 (e_{xx} + e_{yy})^2 + \lambda_3 e_{\alpha\beta} e_{\beta\alpha} + \lambda_4 e_{zz} (e_{xx} + e_{yy}) + \lambda_5 (e_{xz}^2 + e_{yz}^2) \quad (2.18)$$

Utilizando as propriedades das equações Eqs. (2.14), (2.15) e (2.16), a Eq. (2.18) se reduz a expressão:

$$F_e = \lambda_2 (\nabla \mathbf{n})^2 + \lambda_3 e_{\alpha\beta} e_{\beta\alpha} + \frac{1}{4} \lambda_5 (\mathbf{n} \times (\nabla \times \mathbf{n}))^2 \quad (2.19)$$

Usando a identidade:

$$e_{\alpha\beta} e_{\beta\alpha} = (\nabla \mathbf{n})^2 + \partial_\alpha (\partial_\beta n_\beta \partial_\beta n_\alpha) - \partial_\beta (\partial n_\beta \partial_\alpha n_\alpha) + \frac{1}{2} (\nabla \times \mathbf{n})^2$$

em que o terceiro termo da relação anterior deve estar de acordo com a suposição decorrente da integral de superfície. Logo:

$$(\nabla \times \mathbf{n})^2 = (\mathbf{n} \cdot (\nabla \times \mathbf{n}))^2 + (\mathbf{n} \times (\nabla \times \mathbf{n}))^2$$

Observa-se que  $F_e$  é a soma de três contribuições:

$$(\nabla \mathbf{n})^2, \quad (\mathbf{n} \cdot (\nabla \times \mathbf{n}))^2 \quad e \quad (\mathbf{n} \times (\nabla \times \mathbf{n}))^2$$

Para os termos de  $F_c$ , a relação deve ser;

$$F_c = \mu_1 (\nabla \times \mathbf{n})^2 + \mu_2 (\mathbf{n} \times (\nabla \times \mathbf{n}))^2 \quad (2.20)$$

Os termos que faltam, são os termos cruzados. Somente os compatíveis com a simetria são:

$$\begin{aligned} (\nabla \times \mathbf{n})_x e_{xz} + (\nabla \times \mathbf{n})_y e_{yz} &= 0 \\ (\nabla \times \mathbf{n})_y e_{zx} - (\nabla \times \mathbf{n})_x e_{zy} &= \frac{1}{2} (\mathbf{n} \times (\nabla \times \mathbf{n}))^2 \end{aligned}$$

Desse modo, a forma geral para  $F_{ec}$  é:

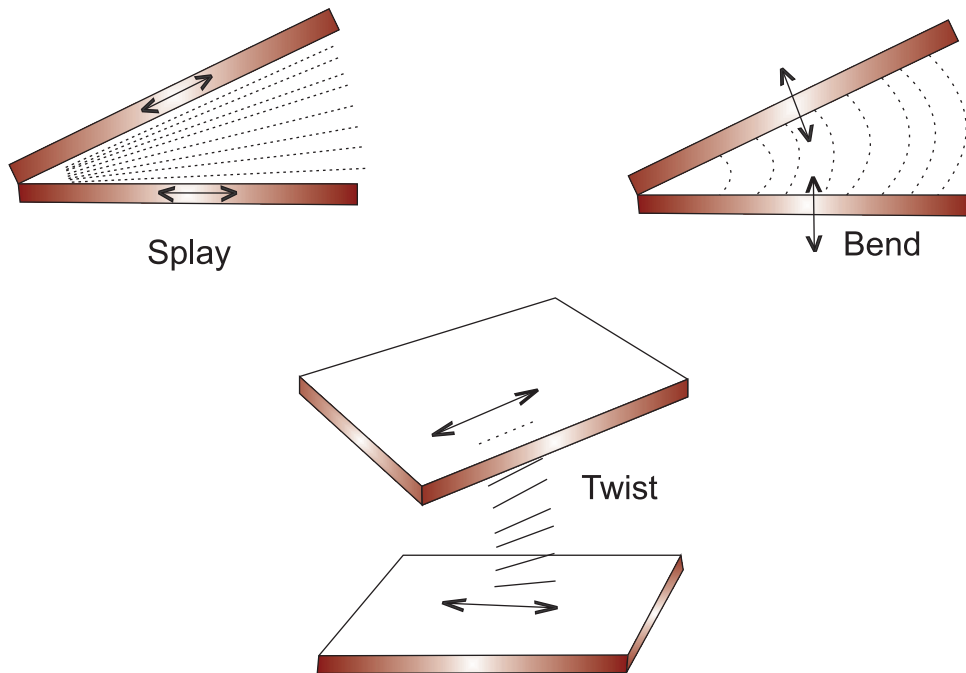
$$F_{ec} = \nu (\mathbf{n} \times (\nabla \times \mathbf{n}))^2 \quad (2.21)$$

Reagrupando as contribuições, ou seja, substituindo as Eqs. (2.19), (2.20) e (2.21), nas Eqs. (2.17), escreve-se:

$$F_d = \frac{1}{2} K_{11} (\nabla \cdot \mathbf{n})^2 + \frac{1}{2} K_{22} [\mathbf{n} \cdot (\nabla \times \mathbf{n})]^2 + \frac{1}{2} K_{33} [\mathbf{n} \times (\nabla \times \mathbf{n})]^2 \quad (2.22)$$

no qual  $K_{11}$ ,  $K_{22}$  e  $K_{33}$  são as constantes elásticas.

A energia de deformação é invariante por orientação na escolha do sistema de coordenadas, isto é, para dextrogiro ou levogiro.



**Figura 2.2** – Representações pictóricas para as deformações *Splay*, associada a constante elástica  $k_1$ , *Twist* e *Bend*, relacionadas as constantes  $K_2$  e  $K_3$  respectivamente. Imagem adaptada de [12].

As constantes elásticas estão associadas as seguintes estruturas de deformação:

- $K_{11}$  é associada a  $\nabla \cdot \mathbf{n} \neq 0$  e é conhecida por *splay*.
- $K_{22}$  à deformação *twist*, dada pelo termo  $\mathbf{n} \cdot \nabla \times \mathbf{n} \neq 0$ .
- A terceira constante elástica está associada com a deformação de *bend*, que ocorre para  $\mathbf{n} \times (\nabla \times \mathbf{n}) \neq 0$ .

É possível ocorrer deformação que são *splay*, *twist* ou *bend* puras. Assim, as constantes elásticas devem ser positivas, caso contrário, uma mesofase nemática sem distorção não corresponderia a um mínimo de energia.

Se for assumido, que as três constantes elásticas são iguais, a Eq. (2.22) pode ser escrita na forma:

$$F_d = \frac{1}{2} \partial_\alpha n_\beta \partial_\beta n_\alpha \quad (2.23)$$

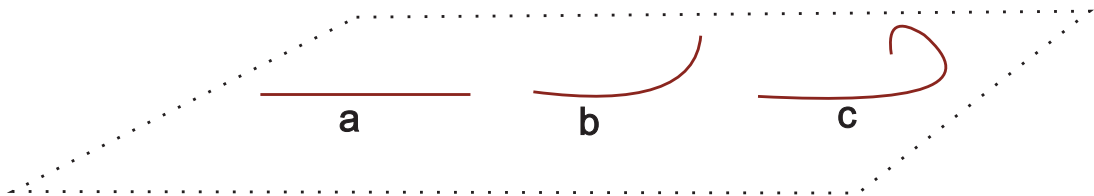
Essa simplificação é útil na realização experimental das determinações das constantes elástica, pois em muitos casos, a forma completa da relação para a energia de deformação possui uma natureza complexa.

# Capítulo 3

## Geometria Diferencial

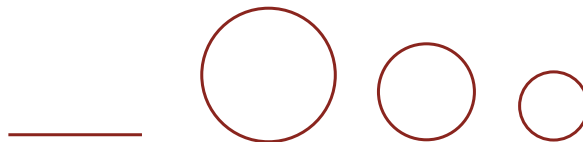
Ao se olhar para um objeto qualquer, as linhas que o compõem (delimitam ou constroem) são reconhecidas e associadas a representações geométricas, tais como, linhas curvas ou retas. De maneira intuitiva, define-se uma linha curva ou reta, em relação a um dado referencial<sup>a</sup>. Por exemplo: Pode-se usar como referência, um plano abaixo do objeto ou até mesmo em função da própria linha. Dessa maneira, o ponto de partida é investigar o conceito de curvatura com uma análise informal e na sequência procurar definir o conceito matematicamente.

Considere três situações distintas, representadas pela Figura 3.1: A figura **a** é claramente um segmento de reta enquanto que as figuras **b** e **c** são curvas diferentes, pois, se entortam (ou se curvam) em uma de suas extremidades, de maneira distinta. Olhando para para as figuras **b** e **c**, intuitivamente é associada uma maior curvatura a curva representada em **c** e uma menor ilustrada em **b**. Desse modo, pode-se definir que a curvatura é o quanto a curva se entorta em relação a um referencial.



**Figura 3.1** – (a) é uma reta, delimitada por dois pontos, ou seja, uma reta euclidiana; (b) e (c) são retas entortando com magnitudes diferentes, ou seja, se afastam de um referencial com inclinações e velocidades diferentes.

Outra situação está representada na Figura 3.2. Ilustra-se de maneira pictórica uma reta e três círculos de raios diferentes, no qual, poderíamos estar observando um palito e moedas de valores diferentes.

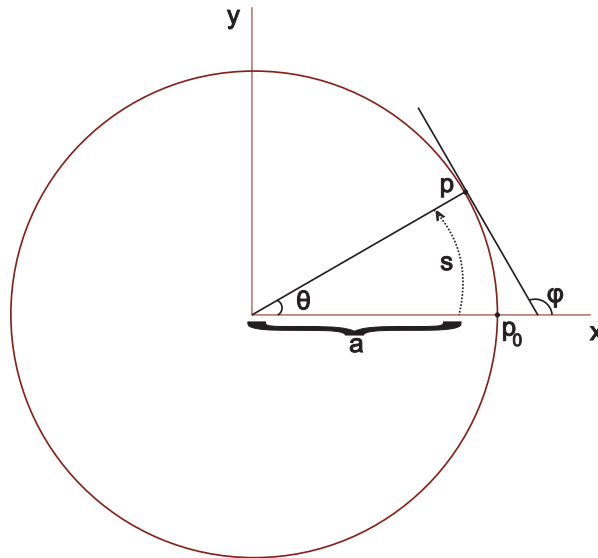


**Figura 3.2** – Círculos de raios diferentes e com curvaturas diferentes, em que do maior para o menor o raio diminui e a curvatura aumenta, em relação ao referencial adotado. A partir da definição matemática para curvatura ficará mais obvio essa relação.

<sup>a</sup>Referencial é entendido momentaneamente como algo a ser utilizado para comparação entre os objetos geométricos, sem a preocupação em uma definição formal.

O procedimento para analisar as três situações distintas apresentadas pela Figura 3.1 foi qualitativa. Desse modo, para se analisar a Figura 3.2 utiliza-se o mesmo procedimento. A partir de um referencial escolhido, um plano abaixo da reta e dos círculos, é possível observar que o círculo de raio maior tem menor curvatura e novamente a reta possui curvatura zero.

Deve-se procurar então, uma forma de definir matematicamente a curvatura. Para isso, considere a figura abaixo:



**Figura 3.3** – Círculo de raio  $a$ , centrada na origem do plano orientado pelos eixos coordenados  $x - y$ , que permite a modelagem para encontrar como uma reta desvia curvando-se, em relação a um eixo coordenado.

Na figura,  $a$  é o raio do círculo,  $s$  é o comprimento de arco,  $\theta$  é o ângulo relativo ao deslocamento sobre o arco entre os pontos  $P$  e  $P_0$  e  $\phi$  é o ângulo que especifica a variação da reta tangente em relação ao eixo coordenado  $x$ .

Foi definido que a curvatura é a variação da curva em relação a um referencial, portanto, considerando a variação da tangente em um ponto, em relação ao arco descrito entre  $P$  e  $P_0$ , ou seja, considerando a variação do ângulo em função do comprimento da curva, então essa variação será [20]:

$$k = \frac{d\phi}{ds} \quad (3.1)$$

em que  $k$  é a curvatura. Os seguintes exemplos servem para testar a definição anterior:

**Exemplo 3.1** *A variação de  $\phi$  (em relação ao eixo  $x$ ) ao se deslocar de um ponto  $P_0$  a  $P$  sobre a reta, é nulo. Assim:*

$$k = \frac{d\phi}{ds} = \frac{d}{ds} [0] = 0$$

**Exemplo 3.2** Observando a Figura 3.3, pode-se escrever o ângulo  $\phi$  como:  $\phi = \theta + \pi/2$  (relação de ângulos externos). Lembrando que o ângulo central é definido por,  $\theta = s/a$ . A curvatura é dada por;

$$k = \frac{d\phi}{ds} = \frac{d}{ds} \left[ \theta + \frac{\pi}{2} \right] = \frac{d}{ds} \left[ \frac{s}{a} + \frac{\pi}{2} \right] = \frac{1}{a}$$

Dos exemplos anteriores, pode-se fazer a seguinte análise: A curvatura da reta é nula (o que era esperado) e a do círculo é inversamente proporcional ao raio,  $R > r$  o que implica em  $k_R < k_r$ , que também está de acordo com a definição não formal.

Foi obtida uma forma de calcular a curvatura de uma reta curvando-se em relação a um eixo coordenado escolhido com a definição anterior, entretanto, é necessário e conveniente refinar e generalizar o conceito de curvatura de forma a não existir uma dependência explícita do processo intuitivo.

## 3.1 Curvas no Plano

### 3.1.1 Representação Analítica de Curvas

Pode-se pensar em curvas no plano ou no espaço como o caminho de um ponto, ou uma partícula em movimento. Desse modo, em coordenadas retangulares, um ponto no plano  $(x, y)$  pode ser expresso em função de um parâmetro,  $\mu$ , que pode ser, por exemplo, o tempo  $t$ , dentro de um intervalo fechado. Dessa forma, as equações paramétricas para a curva em função do parâmetro  $t$  são [22]:

$$x = x(t) ; \quad y = y(t) ; \quad C = C(x, y) \quad (3.2)$$

em que  $C = C(x, y)$  representa a curva em um intervalo fechado  $t_0 \leq t \leq t_1$  como representado pela Figura 3.4. De maneira simplificada, pode-se utilizar a notação para as equações paramétricas anteriores:

$$x_i(t) ; \quad \text{com } i = 1, 2 ; \quad \text{em que } x_1 = x \text{ e } x_2 = y \quad (3.3)$$

no qual, a curva será representada por  $C = C(x_i(t))$ .

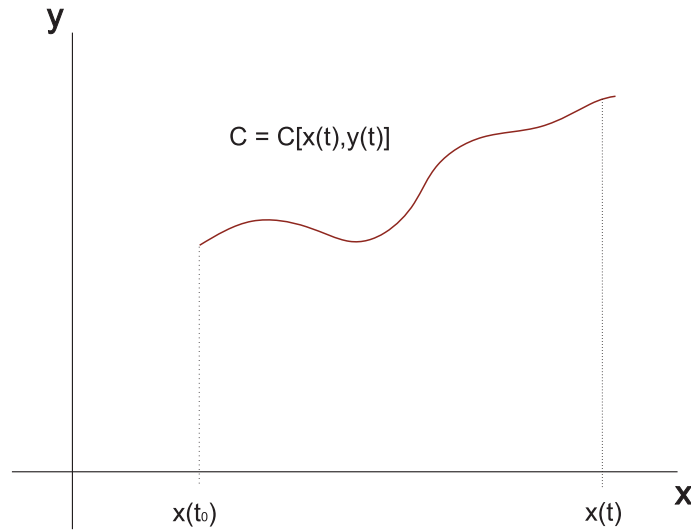
Considerando os vetores de base dados por  $e_1$  e  $e_2$ , pode-se escrever o raio vetor como:

$$\mathbf{r} = \vec{r}(x(t), y(t)) = xe_1 + ye_2 = x_1e_1 + x_2e_2 \quad (3.4)$$

ou simplesmente, para N-dimensões:

$$\mathbf{r} = \sum_{i=1}^N x_i \mathbf{e}_i \quad \text{no qual } i = 1, 2, 3, \dots, N \quad (3.5)$$

Supondo que as funções  $x = x_i(t)$  são valores simples e com um número de derivadas contínuas, ou seja, serão consideradas curvas ditas regulares, em que as derivadas de  $r = r(t)$  não se anulam para qualquer  $t$ , ao contrário de curvas singulares, no qual a derivada pode ser nula em algum ponto.



**Figura 3.4** – Representação de uma curva  $C$  dependente do parâmetro  $t$ , em que pode ser entendida como o deslocamento ponto a ponto de uma partícula em função do tempo, no plano  $x - y$

Para curvas regulares [22, 23], quando se troca a parametrização, por exemplo,  $\mu = f(t)$ , postulando que a função  $f(t)$  seja diferenciável, têm-se que os pontos permanecem regulares quando  $d\mu/dt \neq 0$ .

Dada um representação paramétrica para uma curva, é possível calcular o comprimento da curva entre dois pontos distintos e de escolha arbitrária. Desse modo, supondo inicialmente uma curva  $C$  parametrizada por  $t$  real, o comprimento de arco da curva em um intervalo fechado,  $t_0 \leq t \leq t_1$ , é dado pela integral:

$$l(t) = \int_{t_0}^{t_1} \sqrt{(\dot{x})^2 + (\dot{y})^2} dt = \int_{t_0}^{t_1} \sqrt{\dot{\mathbf{r}} \cdot \dot{\mathbf{r}}} dt \quad (3.6)$$

em que  $\sqrt{\dot{\mathbf{r}} \cdot \dot{\mathbf{r}}} = \sqrt{\langle \dot{\mathbf{r}}, \dot{\mathbf{r}} \rangle} = \|\mathbf{v}\|$  e sendo necessário,  $\dot{r}_i = dr_i/dt$ .

O produto escalar de um vetor por ele mesmo é sempre positivo para curvas reais, implicando em um crescimento do comprimento de arco na direção de crescimento do parâmetro escolhido. Curvas com essas características são ditas orientadas.

Parametrizando a curva  $C$  por  $l$  (pelo próprio comprimento de arco), o que é sempre legítimo, desde que  $dl/dt \neq 0$ , observa-se que; a parametrização em

função do comprimento de arco é vantajosa, pois, considerando a Eq. (3.8) e o teorema fundamental do cálculo [21], tem-se:  $dl/dt = \sqrt{\dot{\mathbf{r}} \cdot \dot{\mathbf{r}}}$ , ou seja,  $dl/dt = \|\mathbf{v}\|$ . Portanto, como  $dl/dt > 0$  pode-se inverter a parametrização para  $t = t(l)$ , de tal forma que:

$$\frac{d\mathbf{r}}{dl} = \frac{d\mathbf{r}}{dt} \frac{dt}{dl} = \frac{\mathbf{v}}{\|\mathbf{v}\|} = 1 \quad (3.7)$$

Esse resultado mostra que a derivada do raio-vetor, parametrizada pelo comprimento de arco, é um vetor tangente a curva e unitário, isto é, com sua norma constante,  $v^2 = \langle \mathbf{v}, \mathbf{v} \rangle = 1$ . Esse vetor pode variar sua direção, mas não seu comprimento. Observa-se que qualquer parametrização a qual fornece vetores com norma constante, diz-se que o parâmetro escolhido é natural.

Considerando o raio-vetor dado por  $\mathbf{r} = \mathbf{r}(r_i(t))$ . Se a curva for reparametrizada, por um parâmetro natural o comprimento de arco mantém a forma. Isso pode ser expresso pela substituição da equação,

$$l(t) = \int_{t_0}^{t_1} \sqrt{\dot{\mathbf{r}} \cdot \dot{\mathbf{r}}} dt \quad (3.8)$$

por:

$$dl^2 = dx^2 + dy^2 = d\mathbf{r} \cdot d\mathbf{r} \quad (3.9)$$

o qual é independente da parametrização.

O vetor unitário encontrado, tangente a curva, possui um papel importante em curvatura, afinal, estudando o seu comportamento ao longo de uma curva qualquer, informações sobre como a curva se dobra, em relação a um parâmetro ou não, podem ser obtidas apenas se concentrando na mudança de direção desse objeto matemático.

### 3.1.2 Curvatura e as Fórmulas de Serret-Frenet

Um vetor com norma constante, entretanto, variável, ou seja, que pode mudar de direção, no espaço Euclidiano possui a propriedade de ser ortogonal a sua derivada em relação ao parâmetro natural, ou seja, matematicamente representa-se essa informação como:  $v = \mathbf{v} \perp \dot{\mathbf{v}} = \dot{v}$  [24]. O vetor encontrado na seção anterior possui essa propriedade, desse modo, é conveniente provar esse resultado<sup>b</sup>.

**Prova 3.1** *Escrevendo o vetor unitário com norma constante,  $v = v_1 e_1 + v_2 e_2$ , tem-se que o produto interno (ou escalar) é:  $v^2 = \langle v, v \rangle$ . Esse resultado implica em  $v^2 = (v_1)^2 e_1 + (v_2)^2 e_2$ . Calculando então a derivada do módulo quadrado;*

<sup>b</sup>Não será utilizado a notação em negrito para vetor nas seções seguintes, assim para qualquer vetor:  $\vec{a} = \mathbf{a} = a$

$$\frac{d}{dt} \langle v, v \rangle = \langle \dot{v}, v \rangle + \langle v, \dot{v} \rangle$$

logo,

$$\frac{d}{dt} |v|^2 = 2 \langle \dot{v}, v \rangle$$

Observando então o resultado, e sabendo que  $|v| = \text{cte}$ , então  $\frac{d}{dt} |v| = 0$ . Assim, pode-se escrever:

$$2 \langle \dot{v}, v \rangle = 0$$

para que a relação anterior seja válida, ou seja, a igualdade exista,  $\langle \dot{v}, v \rangle = 0$ . Como o produto interno é nulo, isso implica que os dois vetores devem ser ortogonais.

Agora, considerando uma curva parametrizada em função do parâmetro natural, pode-se calcular a variação do vetor tangente,  $v$ , em relação a  $l$ , para se obter um vetor normal a curva.

Enquanto a velocidade (vetor tangente a curva) vira a medida que a curva dobra, variando apenas a sua direção, a derivada de  $v$  irá fornecer a orientação em que  $v$  está variando.

Chamando  $\dot{v} = w$ , de imediato pode ser escrita a relação;

$$\frac{dv}{dl} = w = kn \tag{3.10}$$

em que  $n = n(l)$  é um vetor unitário,  $n = w/|w|$ , na direção da aceleração. Escrevendo;

$$\frac{dv}{dl} = w = kn \Rightarrow \frac{w}{n} = \frac{w}{w/|w|} = k \tag{3.11}$$

vê-se que  $k = |w|$ , isto é,  $k$  é a magnitude da aceleração. Assim:

**Definição 3.1** A magnitude do vetor normal a curva,  $k = |w|$ , sob as condições de que a curva seja parametrizada pelo comprimento natural,  $l$ , é chamada de curvatura.

É possível calcular a variação do vetor unitário  $n$  em relação a  $l$ . É conhecido que a derivada desse vetor,  $dn/dl$ , será normal a sua direção, assim:

$$\frac{dn}{dl} = \alpha v = -kv \tag{3.12}$$

$n$  será um vetor na mesma direção ou oposta de  $v$ .

**Prova 3.2** Sabe-se que  $|v_l| = 1$ , assim  $|\alpha| = dn/dl$ . É necessário determinar então o valor de  $\alpha$ . Da relação:

$$\frac{d}{dt} \langle v, n \rangle = \langle \dot{v}, n \rangle + \langle v, \dot{n} \rangle$$

desse modo, como  $\frac{d}{dt} \langle v, n \rangle = 0$  escreve-se:

$$0 = \langle \dot{v}, n \rangle + \langle v, \dot{n} \rangle = k + \alpha \langle v, v \rangle = k + \alpha$$

Portanto o valor para a constante é  $\alpha = -k$

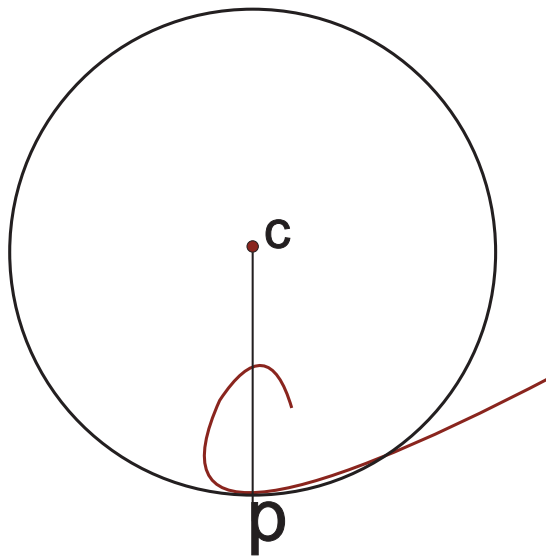
Esses resultados podem ser resumidos, assim: Dada uma equação paramétrica de uma curva  $r = r(l)$  em termos do parâmetro natural  $l$ , seguem as fórmulas de Serret-Frenet [21, 24]:

$$\frac{dv}{dl} = kn \quad (3.13)$$

$$\frac{dn}{dl} = -kv \quad (3.14)$$

Com esses resultados, ou seja, as equações de Frenet, pode-se descrever o comportamento de curvas no plano. A primeira equação irá fornecer como a curva se dobra em função do parâmetro natural, enquanto que a segunda traz a informação referente a qual direção ela se curva.

Uma outra grandeza interessante pode ser definida como: O recíproco da curvatura,  $R = 1/k$  é chamado de raio de curvatura, o qual geometricamente é um círculo tangente a curva em um determinado ponto  $p$  apontando para o lado interno da curva e possuindo a mesma curvatura que a curva.



**Figura 3.5** – Círculo interno a curva no ponto  $p$ , centrado em  $c$ , representando o raio de curvatura, recíproco da curvatura, no ponto  $p$ .

Considere o seguinte exemplo: Um círculo de raio  $a$ , possui a curvatura e o raio de curvatura dados por:

**Exemplo 3.3** Para um círculo, escreve-se o raio-vetor:  $r = a \cos \theta e_1 + a \sin \theta e_2$ , em que  $x = a \cos \theta$  e  $y = a \sin \theta$ . Colocando a origem em qualquer ponto, a equação paramétrica fica:  $x = x_0 + a \cos \theta$  e  $y = y_0 + a \sin \theta$ . Lembrando que  $\theta = l/a$  para pequenos ângulos, pode-se escrever as equações para o círculo em função do comprimento natural. Logo:

$$x = x_0 + a \cos \left( \frac{l}{a} \right) \quad e \quad y = y_0 + a \sin \left( \frac{l}{a} \right)$$

Calculando o vetor tangente

$$v_x = \frac{dx}{dl} = \frac{d}{dl} \left[ x_0 + a \cos \left( \frac{l}{a} \right) \right] = -\sin \left( \frac{l}{a} \right)$$

e para a componente  $y$ ;

$$v_y = \frac{dy}{dl} = \frac{d}{dl} \left[ y_0 + a \sin \left( \frac{l}{a} \right) \right] = \cos \left( \frac{l}{a} \right)$$

Dessa forma, o vetor tangente fica como:

$$v = -\sin \left( \frac{l}{a} \right) e_1 + \cos \left( \frac{l}{a} \right) e_2$$

Calculando a aceleração,  $w = \frac{dv}{dl}$ ;

$$\frac{dv_x}{dl} = \frac{d}{dl} \left( -\sin \left( \frac{l}{a} \right) \right) = \frac{1}{a} \cos \left( \frac{l}{a} \right)$$

Resolvendo para a componente  $y$ , a aceleração,  $w$ , fica:

$$w = -\frac{1}{a} \cos \left( \frac{l}{a} \right) e_1 - \frac{1}{a} \sin \left( \frac{l}{a} \right) e_2$$

Como a curvatura é a magnitude da aceleração:

$$|w| = \sqrt{\frac{1}{a^2} \left( \cos^2 \left( \frac{l}{a} \right) + \sin^2 \left( \frac{l}{a} \right) \right)} = \sqrt{\frac{1}{a^2}}$$

Assim, a curvatura para o círculo é  $k = \frac{1}{a}$  e o raio de curvatura para esse caso é o próprio raio do círculo,  $R = a$ .

O resultado obtido acima, obviamente, é o mesmo do Exemplo 2, entretanto, apesar de não existir a necessidade de recorrer as fórmulas de Serret-Frenet para um círculo, já é possível notar que o formalismo desenvolvido é mais amplo que a primeira definição discutida.

## 3.2 Curvas no Espaço $\mathbb{R}^3$

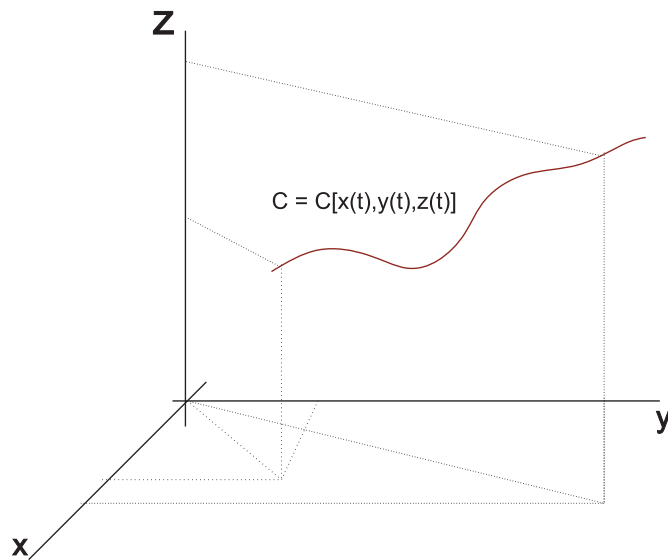
Considere uma curva,  $r = r(l)$ , no espaço dado pelas coordenadas cartesianas  $x, y$ , e  $z$ , e parametrizada em função do comprimento de arco, pode-se escrever a distância entre dois pontos, em um intervalo fechado, pela integral [22][23]:

$$l = \int_{l_0}^l |v| dl \quad (3.15)$$

em que  $|v| = \sqrt{\dot{x}^2 + \dot{y}^2 + \dot{z}^2}$ . A curvatura foi definida como a magnitude do vetor aceleração. Dessa forma, em três dimensões, o vetor normal à curva pode ser escrito, considerando  $e = e_i$  ( $i = 1, 2, 3$ ) como os vetores de base, pela equação:

$$w_l = \ddot{x}e_1 + \ddot{y}e_2 + \ddot{z}e_3 \quad (3.16)$$

A diferença para o caso de uma curva planar é que; no primeiro, a curva ficava *confinada* no plano (formado pelos vetores velocidade e aceleração ou as próprias coordenadas), enquanto que para o caso espacial, essa pode se afastar do plano formado pelos vetores tangente e normal à curva. Como essa curva pode agora se desviar do plano, é preciso procurar um vetor que esteja na mesma direção desse novo grau de liberdade da curva.



**Figura 3.6** – Curva parametrizada em  $t$ , em que será dependente das componentes  $x$ ,  $y$  e  $z$ , ambos dependentes do parâmetro natural.

Sabe-se que dois vetores geram um terceiro, normal ao plano formado pelos dois primeiros, quando tomamos o produto externo entre eles. Dessa forma, considerando dois vetores quaisquer, escreve-se:

$$[A, B] = A \times B = C \quad (3.17)$$

em que  $\vec{A} = A = \mathbf{A}$ ,  $\vec{B} = B = \mathbf{B}$  e  $\vec{C} = C = \mathbf{C}$  são vetores<sup>c</sup> e  $C$  é perpendicular ao plano formado por  $A$  e  $B$ . Explicitamente, o produto externo, nesse caso, é:

$$C = (A^2B^3 - A^3B^2) e_1 + (A^3B^1 - A^1B^3) e_2 + (A^1B^2 - A^2B^1) e_3$$

O produto vetorial possui propriedades relacionado a multiplicação por escalar, soma entre produtos, e simetria, dado por [21][24]:

$$[A, B] = -[B, A]$$

$$[A_1 + A_2, B] = [A_1, B] + [A_2, B]$$

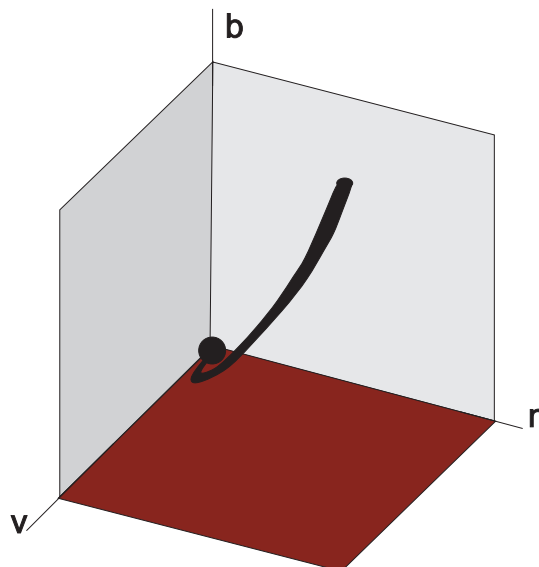
$$[\lambda A, B] = \lambda[A, B] \quad ; \quad \lambda = \text{escalar}$$

$$[[A, B], C] = [[C, A], B] + [[C, B], A] = 0$$

Considere então os vetores tangente e o normal a curva no espaço tridimensional,  $v \perp n$ , pode-se calcular:

$$[v, n] = b$$

em que o novo vetor,  $b$ , é normal a  $v$  e  $n$ , isto é, um vetor binormal apontando na direção perpendicular ao plano osculador<sup>d</sup>.



**Figura 3.7** – Representação do plano osculador, formado pelos vetores  $v$  e  $n$ , no qual o vetor binormal, estará apontando na direção que a curva ascende ou descende.

É necessário definir agora a taxa com que essa curva se afasta do plano

<sup>c</sup>A notação  $[, ]$  será para produto externo será utilizada no decorrer do texto.

<sup>d</sup>Plano formado pelos vetores tangente e normal a curva.

osculador, ou seja, a partir do instante em que pode-se quantificar uma curva afastando-se de um plano e não mais ficando confinada, deve-se procurar a taxa de afastamento.

### 3.2.1 Torção de uma Curva e o Triedro de Serret-Frenet

A análise a seguir refere-se ao comportamento de  $b$  em relação ao comprimento de arco  $l$  [21–24]. Dessa forma, considerando  $[v, n] = b$ , pode-se calcular a derivada em relação ao parâmetro natural, de tal forma que:

$$\frac{db}{dl} = \frac{d}{dl} [v, n] = \left[ \frac{dv}{dl}, n \right] + \left[ v, \frac{dn}{dl} \right] \quad (3.18)$$

logo, reescrevendo:

$$\dot{b} = [\dot{v}, n] + [v, \dot{n}] \quad (3.19)$$

Sendo  $|n| = 1$ , isso implica em  $n \perp \dot{n}$ . Escrevendo  $\dot{n}$  como uma combinação linear  $\dot{n} = \alpha v + \beta b$ , pode-se analisar os termos do lado direito da Eq. (3.19) separadamente:

$$[v, \dot{n}] = [v, \alpha v + \beta b] = \alpha [v, v] + \beta [v, b]$$

$$[v, \dot{n}] = \beta [v, b] = -\beta n$$

em que  $[v, v] = 0$ . Para o segundo termo:

$$\frac{dv}{dl} = \dot{v} = kn \Rightarrow [\dot{v}, n] = k [n, n]$$

o que permite escrever a Eq. (3.18) como:

$$\frac{db}{dl} = -\beta n = \chi n \quad (3.20)$$

em que  $\chi = -\beta$  é menos o vetor binormal.

Uma outra análise refere-se a verificar a expressão  $dn/dl = -kv$ . Visto que se pode escrever  $[b, v]$ , então;

$$\begin{aligned} \frac{d}{dl} [b, v] &= [\dot{b}, v] + [b, \dot{v}] \\ &= [\chi n, v] + [b, kn] \\ &= \chi [n, v] + k [b, n] \\ &= -\chi b - kv \end{aligned}$$

Desse modo:

$$\frac{dn}{dl} = -\chi b - kv \quad (3.21)$$

Com esses resultados, enuncia-se: Para qualquer curva  $r = r(l)$  em um espaço tridimensional euclidiano, no qual  $l$  é o parâmetro natural, segue-se as fórmulas:

$$\frac{dv}{dl} = kn$$

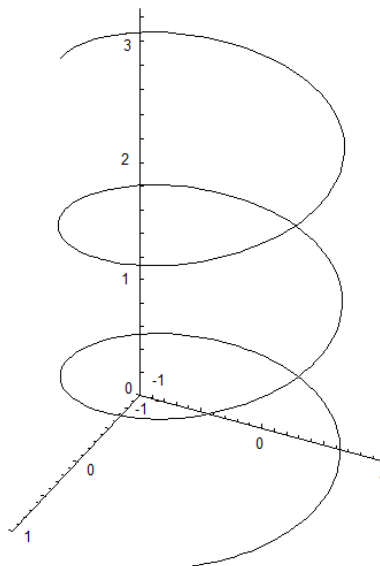
$$\frac{db}{dl} = \chi n$$

$$\frac{dn}{dl} = -\chi b - kv$$

as quais são conhecidas por Triedro de Serret-Frenet.

Das relações acima, observa-se que a torção,  $\chi$ , é dada pela magnitude da variação do vetor binormal em relação ao parâmetro natural, isto é,  $|\chi| = \left| \frac{db}{dl} \right|$ . As três equações dão conta da curvatura, em que direção a curva “enrola” e do afastamento da curva em relação ao plano.

Um exemplo para uma curva torcendo no espaço é a hélice. Considerando uma curva parametrizada por  $x = R \cos t$ ,  $y = R \sin t$  e  $z = t$ , pode-se registrar graficamente a curva e representá-la pela Figura 3.8 abaixo:



**Figura 3.8** – Representação de uma curva com curvatura e torção constante formando uma hélice no espaço. A curva possui uma torção constante, o que pode ser observado pelo raio constante,  $r = \frac{1}{2}$ , da espiral formada.

Foi possível então definir curvatura e torção para curvas espaciais e con-

sequentemente obter relações que permitem calcular esses valores, além de possibilitar definir superfícies curvas a partir de curvas paramétricas.

### 3.3 Geometria de Superfícies

Até o momento foi considerado apenas curvas, mas de maneira análoga pode-se estender esses conceitos para superfícies bidimensionais em um espaço Euclidiano.

A partir dos conceitos previamente discutidos, pode-se construir superfícies utilizando os conceitos de curvas parametrizadas em relação ao parâmetro natural.

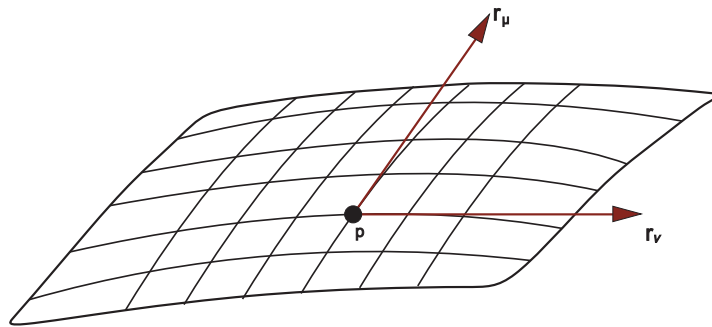
#### 3.3.1 Superfícies em $\mathbb{R}^3$ - Representação Analítica

Para se definir uma superfície, inicialmente pode-se considerar o raio-vetor escrito como;  $\mathbf{r} = r = r(x(t), y(t), z(t))$ , parametrizado em  $t$ , em coordenadas retangulares  $x, y$  e  $z$ . Para uma superfície bidimensional serão necessários dois parâmetros.

Em coordenadas retangulares, as equações paramétricas são:

$$x_i = x_i(\mu, \nu) \quad , \quad \mu_1 \leq \mu \leq \mu_2 \quad e \quad \nu_1 \leq \nu \leq \nu_2$$

Desse modo, para o um dado raio-vetor, a função  $\mathbf{r} = r = r(\mu, \nu)$  define uma superfície bidimensional.



**Figura 3.9** – Representação de uma superfície bidimensional em um espaço  $\mathbb{R}^3$ , com os vetores tangentes as direções principais, a partir de um ponto arbitrário  $p$ . Imagem adaptada de [22].

A superfície deve ser regular (ter todas as derivadas diferentes de zero), conseqüentemente, diferenciável e contínua. Logo, os parâmetros  $\mu$  e  $\nu$  devem ser independentes. Para isso a matriz de transformação,

$$\mathbf{M} = \begin{pmatrix} \frac{dx}{d\mu} & \frac{dy}{d\mu} & \frac{dz}{d\mu} \\ \frac{dx}{d\nu} & \frac{dy}{d\nu} & \frac{dz}{d\nu} \end{pmatrix}$$

deve ter *rank* 2. Quando o *rank* é 1 ou 0 os pontos são singulares. Para o caso de ser 1 em todos os pontos, tem-se na realidade a representação de uma curva.

Quando a superfície é representada por um vetor  $\mathbf{r} = \mathbf{r}(\mu, \nu)$ , ou de forma explícita,  $\mathbf{r} = x(\mu, \nu) \mathbf{e}_1 + y(\mu, \nu) \mathbf{e}_2 + z(\mu, \nu) \mathbf{e}_3$ , a condição<sup>e</sup> para que o *rank* seja 2 é  $r_\mu \times r_\nu \neq 0$ .

Outra condição de regularidade é, por exemplo, quando se considera uma superfície dada por  $F(x, y, z) = 0$ . Portanto:

$$\vec{\nabla} F \neq 0$$

ou seja, o gradiente da função deve ser não nulo. Isto quer dizer que não existe uma descontinuidade sobre a superfície. Por exemplo: Uma representação esférica terá um ponto singular, na origem do eixo coordenado, entretanto, esse ponto não pertence a superfície. O gradiente da função sobre a superfície então será não nulo o que implica em uma não descontinuidade [22, 23].

### 3.3.2 Curvas, Superfícies e a Primeira Forma Fundamental

O comprimento de arco em  $\mathbb{R}^3$  é dado, de maneira análoga ao caso bi-dimensional, pela integral<sup>f</sup>;

$$l(t) = \int_{t_0}^{t_1} \sqrt{(\dot{x})^2 + (\dot{y})^2 + (\dot{z})^2} dt = \int_{t_0}^{t_1} \sqrt{\dot{\mathbf{r}} \cdot \dot{\mathbf{r}}} dt \quad (3.22)$$

Observando a equação acima, pode-se pensar em encontrar um par de funções  $\mu = \mu(t)$  e  $\nu = \nu(t)$  de forma a expressar uma curva confinada na superfície definida.

Essas funções podem ser determinadas da seguinte maneira:

$$\begin{aligned} x &= x(\mu(t), \nu(t)) \\ y &= y(\mu(t), \nu(t)) \\ z &= z(\mu(t), \nu(t)) \end{aligned} \quad (3.23)$$

Lembrando que a escolha da parametrização é arbitrária, mas com um interesse em particular ao parâmetro que forneça o comprimento do vetor, tangente a curva, com norma constante. Desse modo, a partir do módulo quadrado da velocidade  $\|v\|^2 = (\dot{x})^2 + (\dot{y})^2 + (\dot{z})^2$ , é possível escrever a relação abaixo:

$$\frac{dr}{dt} = \frac{dr}{d\mu} \frac{d\mu}{dt} + \frac{dr}{d\nu} \frac{d\nu}{dt} \quad (3.24)$$

<sup>e</sup>A condição para o *rank* envolve as derivadas de  $r$ , ou seja  $r_\mu = \partial r / \partial \mu$  e  $r_\nu = \partial r / \partial \nu$ .

<sup>f</sup>Note que novamente os vetores não são escritos com a flecha sobreposta ou em negrito. Uma vez definido que é um vetor não será sobrecarregada a notação.

ou simplesmente;

$$\dot{r} = r_\mu d\dot{\mu} + r_\nu d\dot{\nu} \quad (3.25)$$

Em função dos vetores de base, definidos anteriormente, a relação é reescrita como<sup>g</sup>:

$$\begin{aligned} r_\mu &= x_\mu e_1 + y_\mu e_2 + z_\mu e_3 \\ r_\nu &= x_\nu e_1 + y_\nu e_2 + z_\nu e_3 \end{aligned} \quad (3.26)$$

Parametrizada a curva sobre a superfície, o próximo passo é calcular a distância entre dois pontos. Assim:

$$dl^2 = \sum_{i=1}^3 dr_i dr_i = dr \cdot dr \quad (3.27)$$

usando a Eq. (3.25) pode-se escrever:

$$\begin{aligned} dl^2 = dr \cdot dr &= (r_\mu d\dot{\mu} + r_\nu d\dot{\nu}) \cdot (r_\mu d\dot{\mu} + r_\nu d\dot{\nu}) \\ &= (r_\mu d\dot{\mu} + r_\nu d\dot{\nu})^2 \\ &= (x_\mu d\dot{\mu} + x_\nu d\dot{\nu})^2 + (y_\mu d\dot{\mu} + y_\nu d\dot{\nu})^2 + (z_\mu d\dot{\mu} + z_\nu d\dot{\nu})^2 \end{aligned}$$

expandindo os termos e rearranjando-os, escreve-se;

$$dl^2 = (x_\mu x_\mu + y_\mu y_\mu + z_\mu z_\mu) \dot{\mu}^2 + 2(x_\mu x_\nu + y_\mu y_\nu + z_\mu z_\nu) \dot{\mu} \dot{\nu} + (x_\nu x_\nu + y_\nu y_\nu + z_\nu z_\nu) \dot{\nu}^2$$

Fazendo a identificação:

$$\begin{aligned} g_{11} &= x_\mu x_\mu + y_\mu y_\mu + z_\mu z_\mu \\ g_{12} &= g_{21} = x_\mu x_\nu + y_\mu y_\nu + z_\mu z_\nu \\ g_{22} &= x_\nu x_\nu + y_\nu y_\nu + z_\nu z_\nu \end{aligned} \quad (3.28)$$

tem-se:

$$dl^2 = g_{ij} dx^i dx^j \quad \text{para } x^1 = \mu \text{ e } x^2 = \nu$$

---

<sup>g</sup>Novamente deve-se atentar ao fato do índice subscrito indicar uma derivada em relação ao parâmetro, por exemplo;  $x_\mu = \partial x / \partial \mu$ .

Apenas por convenção, a notação anterior pode ser escrita como:  $g_{11} = E$ ,  $g_{12} = g_{21} = F$  e  $g_{22} = G$ . O elemento de arco então será:

$$dl^2 = E d\mu^2 + 2F d\mu d\nu + G d\nu^2 \quad (3.29)$$

Para se calcular o comprimento de uma curva entre dois pontos integra-se a relação anterior. Logo:

$$l = \int_{t_0}^{t_1} \sqrt{E \left( \frac{d\mu}{dt} \right)^2 + 2F \frac{d\mu}{dt} \frac{d\nu}{dt} + G \left( \frac{d\nu}{dt} \right)^2} dt \quad (3.30)$$

Observa-se que o comprimento de arco era dado por  $dl^2 = dr \cdot dr$  e agora é dado por  $dl^2 = g_{ij} dx^i dx^j$ . O termo  $g_{ij}$  é chamado de métrica e assume os valores,  $E$ ,  $F$  e  $G$ . Observando as Eq. (3.29), os coeficientes da métrica são:  $g_{ij} = \langle r_{x^i}, r_{x^j} \rangle$ .

O elemento diferencial de arco forneceu uma expressão quadrática conhecida por **primeira forma fundamental**, representada por  $I$ . Desse modo, reescrevendo o elemento de arco, Eq. (3.29), encontra-se [22–24]:

$$I = E d\mu^2 + 2F d\mu d\nu + G d\nu^2 \quad (3.31)$$

Para ilustrar o cálculo dos coeficiente da métrica,  $g_{ij}$ , para um superfície arbitrária, considere o exemplo na sequência:

**Exemplo 3.4** *Uma superfície dada por  $z = f(x, y)$ . A métrica em termos das coordenadas  $x = \mu$  e  $y = \nu$  é? Considerando o coeficiente  $g_{11} = x_\mu x_\mu + y_\mu y_\mu + z_\mu z_\mu$ . Dessa forma:*

$$\begin{aligned} g_{11} &= \frac{\partial x}{\partial \mu} \frac{\partial x}{\partial \mu} + \frac{\partial y}{\partial \mu} \frac{\partial y}{\partial \mu} + \frac{\partial f(\mu, \nu)}{\partial \mu} \frac{\partial f(\mu, \nu)}{\partial \mu} \\ &= \frac{\partial \mu}{\partial \mu} \frac{\partial \mu}{\partial \mu} + \frac{\partial \nu}{\partial \mu} \frac{\partial \nu}{\partial \mu} + \frac{\partial f(\mu, \nu)}{\partial \mu} \frac{\partial f(\mu, \nu)}{\partial \mu} \\ &= 1 + \frac{\partial}{\partial \mu} (H(\mu) + H(\nu)) + \frac{\partial}{\partial \nu} (H(\mu) + H(\nu)) \end{aligned} \quad (3.32)$$

em que a função  $f(\mu, \nu)$  é separada em duas partes que dependem apenas de um parâmetro, para facilitar os cálculos. Dessa forma, resolvendo as derivadas:

$$g_{11} = 1 + H_\mu H_\mu$$

como  $H$  é  $f$  derivada em  $\mu$  e  $x = \mu$ , logo;

$$E = g_{11} = 1 + f_x^2$$

Procedendo da mesma forma obtemos os outros coeficientes, dado por:

$$F = g_{12} = f_x f_y \quad G = g_{22} = 1 + f_y^2$$

Dessa maneira pode-se escrever a primeira forma fundamental como:

$$I = (1 + f_x^2) dx^2 + 2f_x f_y dx dy + (1 + f_y^2) dy^2$$

### 3.3.3 Segunda Forma Fundamental

Considere uma curva  $C$  passando por um ponto  $p$  arbitrário, sobre uma superfície. A curvatura de  $C$  pode ser encontrada a partir da variação do vetor tangente a curva em função do parâmetro natural. Dessa forma, escreve-se:

$$\frac{dv}{dl} = kn = \frac{d^2r}{dl^2} \quad (3.33)$$

Decompondo o vetor  $k$  em duas componentes  $k_n$ , curvatura normal, e  $k_g$  curvatura geodésica, a curvatura será então a soma das componentes;

$$k = k_n + k_g \quad (3.34)$$

Inicialmente, será considerado apenas a componente normal da curvatura. Da equação  $v \cdot N = 0$ , isto é, o vetor normal a superfície é perpendicular ao vetor tangente a curva, pode-se encontrar o vetor normal com a relação:  $N = [r_\mu, r_\nu]$ .

Como é necessário o vetor aceleração, diferencia-se  $v$  e na sequência se calcula a sua projeção no vetor normal a superfície. Assim, associa-se a curvatura da curva a curvatura da superfície em um ponto.

Considere a relação;

$$\frac{dv}{dl} \cdot N + v \cdot \frac{dN}{dl} = 0$$

Tem-se;

$$\frac{dv}{dl} \cdot N = w \cdot N = -v \cdot \frac{dN}{dl} = -\frac{dr \cdot dN}{dl \cdot dl}$$

ou,

$$k_n = -\frac{dr \cdot dN}{dr \cdot dr} \quad (3.35)$$

Considerando as diferenciais do vetor normal a superfície e do raio vetor,

$$dN = N_\mu d\mu + N_\nu d\nu \quad e \quad dr = r_\mu d\mu + r_\nu d\nu$$

ao substituir em (3.35), encontra-se:

$$K_n = \frac{ed\mu^2 + 2fd\mu d\nu + gd\nu^2}{Ed\mu^2 + 2Fd\mu d\nu + Gd\nu^2} \quad (3.36)$$

A curvatura normal então depende de duas formas quadráticas, a  $I$  e a  $II$  dada por [22, 23, 25]:

$$II = ed\mu^2 + 2fd\mu d\nu + gd\nu^2 \quad (3.37)$$

os coeficientes dessa segunda forma quadrática são:  $e = -\langle r_\mu, N_\mu \rangle$ ,  $g = -\langle r_\nu, N_\nu \rangle$  e  $f = -\langle r_\mu, N_\nu \rangle = -\langle r_\nu, N_\mu \rangle$ .

A forma quadrática que aparece no denominador da Eq. (3.36) é conhecida como **segunda forma fundamental**. A forma  $II$  esta relacionada com a curvatura normal da superfície. Pode-se explicitar essa condição em suas componentes, para isso, observe que:  $\langle r_\mu, N \rangle = 0$ . Logo;

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \langle r_\mu, N \rangle &= \frac{dr_\mu}{dt} \cdot N + r_\mu \cdot \frac{dN}{dt} = 0 \\ &= \langle r_{\mu\mu}, N \rangle + \langle r_\mu, N_\mu \rangle \end{aligned}$$

o que permite escrever:

$$\langle r_{\mu\mu}, N \rangle = -\langle r_\mu, N_\mu \rangle \quad (3.38)$$

Repetindo esse procedimento para todos os outros coeficientes, tem-se;

$$e = \langle r_{\mu\mu}, N \rangle \quad f = \langle r_{\mu\nu}, N \rangle \quad g = \langle r_{\nu\nu}, N \rangle \quad (3.39)$$

A curvatura normal é fornecida pela razão entre as duas formas quadráticas. Ao se reescrever a Eq. (3.36) como:

$$K_n = \frac{b_{ij} dx^i dx^j}{g_{ij} dx^i dx^j} \quad (3.40)$$

pode-se escrever as matrizes associadas as formas fundamentais. Sendo para a primeira forma:

$$G = \begin{pmatrix} g_{11} & g_{12} \\ g_{21} & g_{22} \end{pmatrix}$$

e para a segunda:

$$B = \begin{pmatrix} b_{11} & b_{12} \\ b_{21} & b_{22} \end{pmatrix}$$

em que os coeficientes  $b_{ij}$  assumem os valores  $e$ ,  $f$  e  $g$ . Escrever as matrizes associadas ao par de formas quadráticas é importante para a análise de máximos ou mínimos (no Apêndice B, há um exemplo) e direções principais das superfícies, entretanto, é interessante considerar uma forma prática para se calcular os coeficientes da segunda forma fundamental.

O vetor normal a superfície é dado por:

$$N = \frac{r_\mu \times r_\nu}{\sqrt{EG - F^2}} \quad (3.41)$$

em que  $EG - F^2 = r_\mu \times r_\nu$ . Para o coeficiente  $e = \langle r_{\mu\mu}, N \rangle$ , escreve-se:

$$\langle r_{\mu\mu}, N \rangle = \langle r_{\mu\mu}, (r_\mu \times r_\nu) \rangle \frac{1}{\sqrt{EG - F^2}}$$

no qual o coeficiente  $e$  é dado por um produto misto, isto é, a operação escalar entre o produto vetorial de dois vetores com um terceiro vetor. A relação anterior fica então da seguinte forma:

$$e = \frac{(r_{\mu\mu} r_\mu r_\nu)}{\sqrt{EG - F^2}}$$

em que:

$$(r_{\mu\mu} r_\mu r_\nu) = \det \begin{pmatrix} x_{\mu\mu} & y_{\mu\mu} & z_{\mu\mu} \\ x_\mu & y_\mu & z_\mu \\ x_\nu & y_\nu & z_\nu \end{pmatrix}$$

Assim realizando o mesmo procedimento para os demais coeficientes, encontra-se [23, 24]:

$$e = \frac{(r_{\mu\mu} r_\mu r_\nu)}{\sqrt{EG - F^2}} \quad f = \frac{(r_{\mu\nu} r_\mu r_\nu)}{\sqrt{EG - F^2}} \quad g = \frac{(r_{\nu\nu} r_\mu r_\nu)}{\sqrt{EG - F^2}} \quad (3.42)$$

### 3.3.4 A Curvatura de Gauss

Inicialmente, pode-se considerar vetor normal a superfície  $N$  e escrever a sua diferencial  $dN$  em função dos vetores  $r_\mu$  e  $r_\nu$  de tal forma que:

$$N_\mu = a_{11}r_\mu + a_{12}r_\nu$$

$$N_\nu = a_{21}r_\mu + a_{22}r_\nu$$

Tomando o produto interno de cada uma dessas relações por  $r_\mu$  e  $r_\nu$ , encontra-se as seguintes relações:

$$\begin{aligned}\langle r_\mu, N_\mu \rangle &= a_{11} \langle r_\mu, r_\mu \rangle + a_{12} \langle r_\mu, r_\nu \rangle \\ \langle r_\nu, N_\nu \rangle &= a_{21} \langle r_\nu, r_\mu \rangle + a_{22} \langle r_\nu, r_\nu \rangle \\ \langle r_\mu, N_\nu \rangle &= a_{21} \langle r_\mu, r_\mu \rangle + a_{22} \langle r_\mu, r_\nu \rangle \\ \langle r_\nu, N_\mu \rangle &= a_{11} \langle r_\nu, r_\mu \rangle + a_{12} \langle r_\nu, r_\nu \rangle\end{aligned}$$

Para resolver as relações acima, deve-se calcular os coeficientes  $a_{ij}$ . Dessa forma, reescrevendo essas relações com o auxílio das Eq. (3.38) e os coeficientes da primeira forma fundamental,

$$\begin{aligned}-f &= \langle r_\mu, N_\nu \rangle = a_{11} \langle r_\mu, r_\nu \rangle + a_{12} \langle r_\nu, r_\nu \rangle = a_{11}F + a_{12}G \\ -f &= \langle r_\nu, N_\mu \rangle = a_{21} \langle r_\mu, r_\mu \rangle + a_{22} \langle r_\mu, r_\nu \rangle = a_{21}F + a_{22}G \\ -g &= \langle r_\nu, N_\nu \rangle = a_{21} \langle r_\mu, r_\nu \rangle + a_{22} \langle r_\nu, r_\nu \rangle = a_{21}E + a_{22}F \\ -e &= \langle r_\mu, N_\mu \rangle = a_{11} \langle r_\mu, r_\mu \rangle + a_{12} \langle r_\nu, r_\mu \rangle = a_{11}F + a_{12}G\end{aligned}$$

pode-se encontrar a seguinte relação matricial:

$$-\begin{pmatrix} e & f \\ f & g \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} E & F \\ F & G \end{pmatrix}$$

Vale observar que essa relação é semelhante a Eq. (3.40), em que associa-se uma matriz para a forma  $II$ , para a forma  $I$  e uma matriz que transforma uma forma quadrática na outra (reparando que a matriz de coeficientes  $a_{ij}$  faz o papel de  $K_n$ ).

A intenção escrevendo essa equação em forma de matriz, é encontrar a matriz diagonal que transforma uma forma quadrática em outra. Assim, resolvendo a relação anterior para  $a_{ij}$ , encontra-se:

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{pmatrix} = -\begin{pmatrix} e & f \\ f & g \end{pmatrix} \begin{pmatrix} E & F \\ F & G \end{pmatrix}^{-1}$$

Substituindo a inversa da matriz  $G$ , tem-se;

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{pmatrix} = -\frac{1}{\det G} \begin{pmatrix} e & f \\ f & g \end{pmatrix} \begin{pmatrix} G & -F \\ -F & E \end{pmatrix}$$

Os valores dos coeficientes  $a_{ij}$ , são:

$$\begin{aligned}
a_{11} &= \frac{fF - eG}{EG - F^2} \\
a_{12} &= \frac{gF - fG}{EG - F^2} \\
a_{21} &= \frac{eF - fE}{EG - F^2} \\
a_{22} &= \frac{fF - gG}{EG - F^2}
\end{aligned}$$

Como a matriz dada pelos coeficientes  $a_{ij}$  é matriz procurada, o próximo passo é procurar os autovalores associados a ela. Assim;

$$\det \begin{pmatrix} a_{11} + k & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} + k \end{pmatrix} = 0$$

O polinômio característico, para a relação anterior é::

$$k^2 + k(a_{11} + a_{22}) + (a_{11}a_{22} - a_{12}a_{21}) = 0 \quad (3.43)$$

Os autovalores serão as raízes dessa equação de segundo grau. É bem conhecido que o produto das raízes é:

$$k_1 k_2 = a_{11}a_{22} - a_{12}a_{21} \quad (3.44)$$

enquanto que a soma é dada por:

$$k_1 + k_2 = a_{11} + a_{22} \quad (3.45)$$

A Eq. (3.44) nada mais é que o determinante da matriz  $A = a_{ij}$ , enquanto que a Eq. (3.45) é o traço de  $A$ .

Calculando o determinante,

$$\det \begin{pmatrix} \frac{fF - eG}{EG - F^2} & \frac{gF - fG}{EG - F^2} \\ \frac{eF - fE}{EG - F^2} & \frac{fF - gG}{EG - F^2} \end{pmatrix}$$

encontra-se:

$$K = \det(a_{ij}) = \frac{eg - f^2}{EG - F^2} \quad (3.46)$$

Define-se então a **Curvatura Gaussiana** como [24, 25]:

$$K = \frac{\det II}{\det I} \quad (3.47)$$

Calculando o traço de  $A$ , a chamada **Curvatura Média**,  $H$ , é definida

por:

$$H = \frac{1}{2} \text{Tr } A \quad (3.48)$$

Desse modo, substituindo os coeficientes  $a_{ij}$ , a curvatura média fica:

$$H = -\frac{1}{2} \frac{eG - 2fF + gE}{EG - F^2} \quad (3.49)$$

Sendo o par de autovalores distintos, a eles se associam um par de autovetores perpendiculares que fornecem o que é chamado de direções principais do plano de formas quadráticas. A curvatura em cada uma dessas direções é chamada de curvatura principal, sendo dadas por  $k_1$  e  $k_2$  [25, 23].

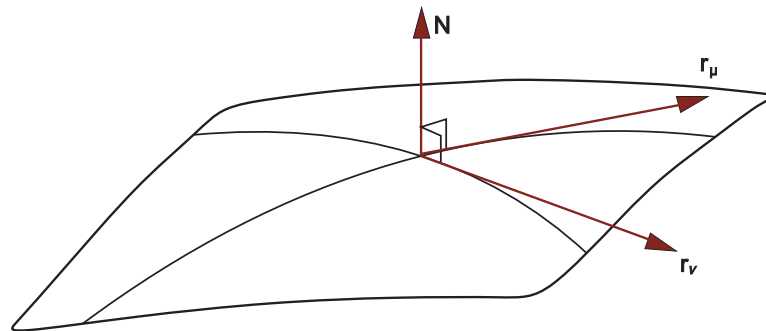
## 3.4 As Equações Fundamentais da Superfície

### 3.4.1 As Equações de Gauss-Weingarten

O próximo passo é verificar se existe relação entre os coeficientes da primeira e da segunda forma fundamental. Claramente, essas relações não poderão ser puramente algébricas, desde que,  $E$ ,  $F$  e  $G$  dependem somente de  $r_\mu$  e  $r_\nu$ , ao passo que os coeficientes da segunda forma  $e$ ,  $f$  e  $g$  dependem também dos vetores  $r_{\mu\mu}$ ,  $r_{\mu\nu}$  e  $r_{\nu\nu}$ <sup>h</sup>.

A natureza dessas relações deverá ser diferencial. Dessa forma, o que será proposto, é uma maneira de encontrar tais relações.

Dada uma superfície por  $r = r(\mu, \nu)$ , representada pela Figura 3.10. Os vetores  $r_\mu$  e  $r_\nu$  são tangentes as curvas na superfície e  $N$  é um vetor binormal aos vetores tangentes e normal a superfície [22, 23, 25, 27].



**Figura 3.10** – Representação de uma superfície dada pelo vetor posição  $r = r(\mu, \nu)$ . São mostrados os vetores tangente apontando nas direções principais e o vetor normal perpendicular a ambos. Imagem adaptada de [22]

Considerando esse triedro móvel em um ponto, dado pelos vetores linearmente independentes, pode-se escrever as relações:

<sup>h</sup>Relações algébricas podem existir em situações especiais [22].

$$\begin{aligned}
r_{\mu\mu} &= \alpha_1 r_\mu + \alpha_2 r_\nu + \alpha_3 N \\
r_{\mu\nu} &= \beta_1 r_\mu + \beta_2 r_\nu + \beta_3 N \\
r_{\nu\nu} &= \gamma_1 r_\mu + \gamma_2 r_\nu + \gamma_3 N
\end{aligned} \tag{3.50}$$

O triedro móvel depende dos parâmetros  $\mu$  e  $\nu$ , diferentemente do caso de curvas em que dependiam apenas de um parâmetro. Deve-se determinar os coeficientes  $\alpha_i$ ,  $\beta_i$  e  $\gamma_i$  ( $i = 1, 2, 3$ ). Para isso, vale observar a tabela de multiplicação escalar.

.	$r_\mu$	$r_\nu$	$N$
$r_\mu$	E	F	0
$r_\nu$	F	G	0
$N$	0	0	1

**Tabela 3.1** – Tabela de multiplicação escalar dos vetores  $r_\mu$  e  $r_\nu$  a superfície e o vetor normal,  $N$ .

Utilizando-se da Tab.(3.1), multiplica-se as Eq. (3.50) de ambos os lados por  $N$ . Dessa forma, considerando a relação para  $r_{\mu\mu}$ , tem-se:

$$\langle r_{\mu\mu}, N \rangle = \alpha_1 \langle r_\mu, N \rangle + \alpha_2 \langle r_\nu, N \rangle + \alpha_3 \langle N, N \rangle$$

de forma direta determina-se o coeficiente  $\alpha_3$ , dado por:

$$\langle r_{\mu\mu}, N \rangle = \alpha_3$$

Com o mesmo procedimento para as outras duas equações os seguintes coeficientes são obtidos;

$$\langle r_{\mu\nu}, N \rangle = \beta_3 \quad \langle r_{\nu\nu}, N \rangle = \gamma_3$$

Fazendo agora a identificação  $e = \alpha_3$ ,  $f = \beta_3$ ,  $g = \gamma_3$  e reescrevendo as Eq. (3.50), escreve-se:

$$r_{\mu\mu} = \alpha_1 r_\mu + \alpha_2 r_\nu + eN \tag{3.51}$$

$$r_{\mu\nu} = \beta_1 r_\mu + \beta_2 r_\nu + fN \tag{3.52}$$

$$r_{\nu\nu} = \gamma_1 r_\mu + \gamma_2 r_\nu + gN \tag{3.53}$$

Os demais coeficientes podem ser determinados a partir do produto es-

calar das Eqs.(3.51), (3.52) e (3.53) por  $r_\mu$  e  $r_\nu$ . Desse modo, considerando a primeira das três equações, ou seja, a Eq. (3.51), e tomando o produto escalar com  $r_\mu$ , a expressão reduz-se à:

$$\langle r_{\mu\mu}, r_\mu \rangle = \alpha_1 \langle r_\mu, r_\mu \rangle + \alpha_2 \langle r_\nu, r_\mu \rangle \quad (3.54)$$

e de  $r_{\mu\mu}$ , tomado produto escalar com  $r_\nu$  obtém-se:

$$\langle r_{\mu\mu}, r_\nu \rangle = \alpha_1 \langle r_\mu, r_\nu \rangle + \alpha_2 \langle r_\nu, r_\nu \rangle \quad (3.55)$$

Dessa modo, encontra-se o seguinte sistema de equações (escrevendo os produtos escalares como coeficientes da forma  $I$ ):

$$\langle r_{\mu\mu}, r_\mu \rangle = \alpha_1 E + \alpha_2 F \quad (3.56)$$

$$\langle r_{\mu\mu}, r_\nu \rangle = \alpha_1 F + \alpha_2 G \quad (3.57)$$

Para encontrar os coeficientes  $\alpha_1$  e  $\alpha_2$ , basta encontrar a solução desse sistema. Da Eq. (3.57), escreve-se:

$$\alpha_1 = \frac{\langle r_{\mu\mu}, r_\nu \rangle - G\alpha_2}{F}$$

assim, substituindo na relação, Eq. (3.56):

$$E \left( \frac{\langle r_{\mu\mu}, r_\nu \rangle - G\alpha_2}{F} \right) + F\alpha_2 = \langle r_{\mu\mu}, r_\mu \rangle$$

$$E \langle r_{\mu\mu}, r_\nu \rangle - EG\alpha_2 + F^2\alpha_2 = \langle r_{\mu\mu}, r_\mu \rangle F$$

fornecendo o seguinte valor para  $\alpha_2$ :

$$\alpha_2 = \frac{E \langle r_{\mu\mu}, r_\nu \rangle - F \langle r_{\mu\mu}, r_\mu \rangle}{EG - F^2} \quad (3.58)$$

Com o mesmo procedimento,  $\alpha_1$  é dado por:

$$\alpha_1 = \frac{G \langle r_{\mu\mu}, r_\mu \rangle - F \langle r_{\mu\mu}, r_\nu \rangle}{EG - F^2} \quad (3.59)$$

Multiplicando a relação  $r_{\nu\nu}$ , Eq. (3.53), por  $r_\mu$  e  $r_\nu$ , tem-se;

$$\langle r_{\nu\nu}, r_\mu \rangle = \gamma_1 E + \gamma_2 F \quad (3.60)$$

$$\langle r_{\nu\nu}, r_\nu \rangle = \gamma_1 F + \gamma_2 G \quad (3.61)$$

Resolvendo o sistema Equações (3.58), os dois últimos coeficientes das Eqs. (3.53) pode ser obtidos. Desse modo, encontra-se:

$$\gamma_1 = \frac{G \langle r_{\nu\nu}, r_\mu \rangle - F \langle r_{\nu\nu}, r_\nu \rangle}{EG - F^2} \quad (3.62)$$

e:

$$\gamma_2 = \frac{E \langle r_{\nu\nu}, r_\nu \rangle - F \langle r_{\nu\nu}, r_\mu \rangle}{EG - F^2} \quad (3.63)$$

Como foi visto, os vetores do triedro dependem dos parâmetros  $\mu$  e  $\nu$ .

Dessa forma:

$$E = \langle r_\mu, r_\mu \rangle \rightarrow \frac{\partial}{\partial \mu} E = 2 \langle r_{\mu\mu}, r_\mu \rangle$$

o que permite escrever;

$$\frac{1}{2} E_\mu = \langle r_{\mu\mu}, r_\mu \rangle$$

Pode-se escrever todos os produtos escalares em função dos coeficientes da primeira forma fundamental. Desse modo, outros termos estão relacionados através das relações:

$$\begin{aligned} \langle r_{\mu\mu}, r_\mu \rangle &= \frac{1}{2} E_\mu & \langle r_{\mu\nu}, r_\mu \rangle &= \frac{1}{2} E_\nu \\ \langle r_{\nu\nu}, r_\nu \rangle &= \frac{1}{2} G_\nu & \langle r_{\nu\mu}, r_\nu \rangle &= \frac{1}{2} G_\mu \end{aligned} \quad (3.64)$$

$$\langle r_{\mu\mu}, r_\nu \rangle = F_\mu - \frac{1}{2} E_\nu \quad \langle r_{\nu\nu}, r_\mu \rangle = F_\nu - \frac{1}{2} E_\mu$$

Para se determinar os coeficientes  $\beta_1$  e  $\beta_2$ , realiza-se o mesmo procedimento anterior para a Equação (3.52), resultando em;

$$\langle r_{\mu\nu}, r_\mu \rangle = \beta_1 E + \beta_2 F \quad (3.65)$$

$$\langle r_{\mu\nu}, r_\nu \rangle = \beta_1 F + \beta_2 G \quad (3.66)$$

Novamente ao se resolver os sistema de equações anteriores encontra-se os parâmetros  $b_1$ ;

$$\beta_1 = \frac{G \langle r_{\mu\nu}, r_\mu \rangle - \langle r_{\mu\nu}, r_\nu \rangle F}{EG - F^2} \quad (3.67)$$

e para o parâmetro  $\beta_2$ :

$$\beta_2 = \frac{E \langle r_{\mu\nu}, r_\nu \rangle - \langle r_{\mu\nu}, r_\mu \rangle F}{EG - F^2} \quad (3.68)$$

Os coeficientes  $\alpha_1, \alpha_2, \beta_1, \beta_2, \gamma_1$  e  $\gamma_2$  estão agora determinados.

Considere ainda os vetores  $N_\mu$  e  $N_\nu$  em termos dos vetores  $r_\mu$  e  $r_\nu$ . É possível escrever outras duas relações de tal forma que:

$$N_\mu = p_1 r_\mu + p_2 r_\nu \quad N_\nu = q_1 r_\mu + q_2 r_\nu \quad (3.69)$$

multiplicando as equações anteriores por  $r_\mu$  e  $r_\nu$  e utilizando a tabela de multiplicação escalar encontra-se os coeficientes  $p_i$  e  $q_i$ , em que  $i$  assume os valores;  $i = 1, 2$ . As Eqs. (3.69) podem então ser reescritas como:

$$N = \frac{fF - eG}{EG - F^2} r_\mu + \frac{eF - fE}{EG - F^2} r_\nu \quad (3.70)$$

e,

$$N = \frac{gF - fG}{EG - F^2} r_\mu + \frac{fF - gE}{EG - F^2} r_\nu \quad (3.71)$$

Substituindo as Eqs. (3.59), (3.58), (3.62), (3.63), (3.67) e (3.68) nas Eqs. (3.51), (3.52) e (3.53) e fazendo uso das Eqs. (3.64) obtêm-se o seguinte conjunto de equações:

$$\begin{aligned} r_{\mu\mu} &= \Gamma_{11}^1 r_\mu + \Gamma_{12}^2 r_\nu + eN \\ r_{\mu\nu} &= \Gamma_{12}^1 r_\mu + \Gamma_{12}^2 r_\nu + fN \\ r_{\nu\nu} &= \Gamma_{22}^1 r_\mu + \Gamma_{22}^2 r_\nu + gN \\ N_\mu &= p_1 r_\mu + p_2 r_\nu \\ N_\nu &= q_1 r_\mu + q_2 r_\nu \end{aligned} \quad (3.72)$$

As Equações (3.73) são conhecidas por equações de Gauss para a superfície [22, 23].

Os símbolos  $\Gamma_{11}^1, \Gamma_{11}^1$ , etc, são chamados de *símbolos de Christoffel*. Encontrando as equações de Gauss verifica-se que explicitamente os seu valores são:

$$\begin{aligned} \Gamma_{11}^1 &= \frac{GE_\mu - 2FF_\mu + FE_\nu}{2(EG - F^2)} & \Gamma_{12}^1 &= \frac{GE_\nu - FG_\mu}{2(EG - F^2)} \\ \Gamma_{22}^1 &= \frac{2GF_\nu - GG_\mu - FG_\nu}{2(EG - F^2)} & \Gamma_{11}^2 &= \frac{2EF_\mu - EE_\nu - FE_\mu}{2(EG - F^2)} \\ \Gamma_{12}^2 &= \frac{EG_\mu - FE_\nu}{2(EG - F^2)} & \Gamma_{22}^2 &= \frac{EG_\nu - 2FF_\nu + FG_\mu}{2(EG - F^2)} \end{aligned}$$

Compactamente se escreve  $\Gamma_{jk}^i$  para  $(i, j, k)$  assumindo os valores  $(1, 2)$ . Desse modo pode se observar, que nos índices inferiores desse símbolo, há simetria, isto é:

$$\Gamma_{jk}^i = \Gamma_{kj}^i \rightarrow \Gamma_{12}^1 = \Gamma_{21}^1$$

$$\Gamma_{12}^2 = \Gamma_{21}^2$$

A simetria dos índices inferiores decorrem das propriedades das derivadas parciais. As derivadas foram definidas como contínuas, o que implica na propriedade de comutação e conseqüentemente, como os índices são referentes as derivadas parciais a troca no par não afetará o resultado.

### 3.4.2 O Teorema de Gauss e as Equações de Codazzi

As equações de Gauss que definem as coordenadas  $(x, y, z)$  da superfície em função dos parâmetros  $\mu$  e  $\nu$  são um conjunto de equações diferenciais. Essas equações não são independentes, mas certamente existem condições de compatibilidade as quais satisfazem.

Essas condições podem ser expressas por:

$$\begin{aligned} (r_{\mu\mu})_{\nu} &= (r_{\mu\nu})_{\mu} \\ (r_{\nu\nu})_{\mu} &= (r_{\mu\nu})_{\nu} \end{aligned}$$

Assim, a partir das condições acima, para uma superfície arbitrária pode-se escrever o par de relações :

$$\frac{\partial}{\partial\nu} (\Gamma_{11}^1 r_{\mu} + \Gamma_{12}^2 r_{\nu} + eN) = \frac{\partial}{\partial\mu} (\Gamma_{12}^1 r_{\mu} + \Gamma_{12}^2 r_{\nu} + fN) \quad (3.73)$$

$$\frac{\partial}{\partial\nu} (\Gamma_{12}^1 r_{\mu} + \Gamma_{12}^2 r_{\nu} + fN) = \frac{\partial}{\partial\mu} (\Gamma_{22}^1 r_{\mu} + \Gamma_{22}^2 r_{\nu} + gN) \quad (3.74)$$

Derivando essas relações de ambos os lados e igualando os coeficientes de  $r_{\mu}$ ,  $r_{\nu}$  e  $N$ , pode-se escrever os coeficientes como:

- Coeficiente de  $r_{\mu}$ :

$$\frac{\partial}{\partial\nu} \Gamma_{11}^1 + \Gamma_{11}^1 \Gamma_{12}^1 + \Gamma_{11}^2 \Gamma_{22}^1 + e \frac{gF - fG}{EG - F^2} = \frac{\partial}{\partial\mu} \Gamma_{12}^1 + \Gamma_{12}^1 \Gamma_{11}^1 + \Gamma_{12}^2 \Gamma_{12}^1 + f \frac{fF - eG}{EG - F^2}$$

- Coeficiente de  $r_\nu$ :

$$\frac{\partial}{\partial \nu} \Gamma_{11}^2 + \Gamma_{11}^1 \Gamma_{12}^2 + \Gamma_{11}^2 \Gamma_{22}^2 + e \frac{fF - gE}{EG - F^2} = \frac{\partial}{\partial \mu} \Gamma_{12}^2 + \Gamma_{12}^1 \Gamma_{11}^2 + \Gamma_{12}^2 \Gamma_{12}^2 + f \frac{eF - fE}{EG - F^2}$$

- Coeficiente de  $N$ :

$$f\Gamma_{11}^1 + g\Gamma_{11}^2 + \frac{\partial e}{\partial \nu} = e\Gamma_{12}^1 + f\Gamma_{12}^2 + \frac{\partial f}{\partial \nu}$$

Rearranjando essas três relações, três novas equações escalares podem ser escritas. Assim:

$$-EK = \frac{\partial}{\partial \mu} \Gamma_{12}^2 - \frac{\partial}{\partial \nu} \Gamma_{11}^2 + \Gamma_{12}^1 \Gamma_{11}^2 - \Gamma_{11}^1 \Gamma_{12}^2 + \Gamma_{12}^2 \Gamma_{12}^2 - \Gamma_{11}^2 \Gamma_{22}^2 \quad (3.75)$$

em que foi obtida do coeficiente de  $r_\nu$  e  $K$  é a curvatura Gaussiana. Para o coeficiente de  $r_\mu$ :

$$FK = \frac{\partial}{\partial \mu} \Gamma_{12}^1 - \frac{\partial}{\partial \nu} \Gamma_{11}^1 + \Gamma_{12}^2 \Gamma_{12}^1 - \Gamma_{11}^2 \Gamma_{22}^1 \quad (3.76)$$

e a última das três,

$$\frac{\partial e}{\partial \nu} - \frac{\partial f}{\partial \mu} = e\Gamma_{12}^1 + f(\Gamma_{12}^2 - \Gamma_{11}^1) - g\Gamma_{11}^2 \quad (3.77)$$

é obtida do coeficiente de  $N$ .

Essas três equações escalares foram obtidas da Eq. (3.73). Para a Eq. (3.74) pode-se realizar o mesmo procedimento e obter outras três equações escalares.

Novamente escrevendo os coeficientes:

- Coeficiente de  $r_\mu$ :

$$\frac{\partial}{\partial \nu} \Gamma_{12}^1 + \Gamma_{12}^1 \Gamma_{12}^1 + \Gamma_{12}^2 \Gamma_{12}^1 + f \frac{fF - gE}{EG - F^2} = \frac{\partial}{\partial \mu} \Gamma_{22}^1 + \Gamma_{22}^1 \Gamma_{11}^1 + \Gamma_{22}^2 \Gamma_{12}^1 + g \frac{fF - eG}{EG - F^2}$$

- Coeficiente de  $r_\nu$ :

$$\frac{\partial}{\partial \nu} \Gamma_{12}^2 + \Gamma_{12}^1 \Gamma_{12}^2 + \Gamma_{22}^2 \Gamma_{12}^2 + f \frac{fF - gE}{EG - F^2} = \frac{\partial}{\partial \mu} \Gamma_{22}^2 + \Gamma_{22}^1 \Gamma_{11}^2 + \Gamma_{22}^2 \Gamma_{12}^2 + g \frac{eF - fE}{EG - F^2}$$

- Coeficiente de  $N$ :

$$f\Gamma_{12}^1 + g\Gamma_{12}^2 + \frac{\partial f}{\partial \nu} = e\Gamma_{22}^1 + f\Gamma_{22}^2 + \frac{\partial g}{\partial \nu}$$

Desses coeficientes as três novas equações são:

$$-FK = \frac{\partial}{\partial \nu}\Gamma_{12}^2 - \frac{\partial}{\partial \mu}\Gamma_{22}^2 + \Gamma_{12}^1\Gamma_{11}^2 - \Gamma_{22}^1\Gamma_{11}^2 + \Gamma_{12}^2\Gamma_{22}^2 - \Gamma_{22}^2\Gamma_{12}^2 \quad (3.78)$$

$$GK = \frac{\partial}{\partial \nu}\Gamma_{12}^1 - \frac{\partial}{\partial \mu}\Gamma_{22}^1 + \Gamma_{12}^1\Gamma_{12}^1 - \Gamma_{22}^1\Gamma_{11}^1 + \Gamma_{12}^1\Gamma_{22}^1 - \Gamma_{22}^1\Gamma_{22}^1 \quad (3.79)$$

$$\frac{\partial f}{\partial \nu} - \frac{\partial g}{\partial \mu} = e\Gamma_{22}^1 + f(\Gamma_{12}^2 - \Gamma_{22}^2) - g\Gamma_{12}^2 \quad (3.80)$$

Deve-se observar que as Eqs. (3.75), (3.76), (3.78) e (3.79) contêm os coeficientes da segunda forma fundamental somente na combinação  $eg - f^2/EG - F^2$ , que, como já definido é a curvatura gaussiana. Do lado direito dessas equações a dependência é apenas em relação aos termos da primeira forma fundamental e as derivadas destes [22, 23, 25].

Expressões que dependem apenas dos coeficientes da primeira forma fundamental são chamados de **bending invariant**, isto é, invariantes de “curvatura” (ou de dobra) da superfície. Como foi visto, o lado esquerdo é a curvatura gaussiana,  $K$ , multiplicada por um coeficiente da forma  $I$ . Portanto, a curvatura total (gaussiana) é um invariante de curvatura.

As Eqs. (3.77) e (3.80),

$$\frac{\partial e}{\partial \nu} - \frac{\partial f}{\partial \mu} = e\Gamma_{12}^1 + f(\Gamma_{12}^2 - \Gamma_{11}^1) - g\Gamma_{11}^2$$

$$\frac{\partial f}{\partial \nu} - \frac{\partial g}{\partial \mu} = e\Gamma_{22}^1 + f(\Gamma_{12}^2 - \Gamma_{22}^2) - g\Gamma_{12}^2$$

são chamadas de **Equações de Codazzi** ou **Mainard-Codazzi**.

Quando a curvatura gaussiana é dita um invariante de “dobra”, isto significa que por deformações da superfície, que não envolvam estiramento, contração ou dilaceração, mantem a curvatura total é inalterada.

Esse invariante deixa a distância entre dois pontos, medidos ao longo de uma curva sobre a superfície, inalterados, além de conservar o ângulo entre dois vetores tangentes aos pontos.

Quando as linhas conservam suas posições, durante o entortar da superfície, a medida das coordenadas e suas derivadas permanecem as mesmas, portanto a função contendo  $E$ ,  $G$ , e  $F$ , e suas derivadas são invariantes.

Propriedades da superfície expressas por esses invariantes são chamadas de *intrínsecas*, logo, a curvatura gaussiana é um invariante intrínseco da superfície.

### 3.4.3 Curvatura Tangencial e Geodésicas

Continuando o estudo das propriedades intrínsecas da superfície, o próximo passo é encontrar a curvatura tangencial, que não foi analisada anteriormente, e as equações para a geodésica[23].

A curvatura tangencial  $K_g$  é a projeção do vetor curvatura  $K$  sobre o plano tangente em um ponto  $P$  sobre a superfície. Anteriormente  $k$  foi decomposto na forma:

$$k = k_n + k_g$$

A curvatura normal é na direção normal,  $N$ , da superfície. Para a curvatura tangencial, define-se uma direção  $u$ , tangente a superfície. Assim,  $u \perp v$ , no mesmo sentido que  $v \rightarrow u$ ,  $r_\mu \rightarrow r_\nu$ . Dessa forma a componente tangencial pode ser escrita na forma:

$$k_g = k_g \cdot u \tag{3.81}$$

Como,  $\langle u, k_n \rangle = 0$  e  $\langle u, (\langle k_n, N \rangle) \rangle = 0$ . Então:

$$\begin{aligned} k_g &= \left\langle u, \frac{dv}{dl} \right\rangle = \langle u, v' \rangle \\ &= \langle (N \times v), v' \rangle \\ &= (vv'N) \end{aligned} \tag{3.82}$$

em que o vetor tangente satisfaz:

$$v = r_\mu \mu' + r_\nu \nu', \quad \mu' = \frac{d\mu}{dl} \quad e \quad \nu' = \frac{d\nu}{dl}$$

A derivada em relação ao comprimento de arco fica;

$$v' = r_{\mu\mu} \mu'^2 + 2r_{\mu\nu} \mu' \nu' + r_{\nu\nu} \nu'^2 + r_{\mu\mu}'' + r_{\nu\nu}'' \tag{3.83}$$

Assim, expandindo a Eq. (3.82):

$$\begin{aligned}
(vv'N) = & \left[ (r_\mu \times r_{\mu\mu}) \mu'^3 + (2r_\mu \times r_{\mu\nu} + r_\nu \times r_{\mu\mu}) \mu'^2\nu' \right. \\
& + (r_\mu \times r_{\nu\nu} + 2r_\nu \times r_{\mu\mu}) \mu'\nu'^2 + (r_\nu \times r_{\nu\nu}) \nu'^3 \left. \right] \cdot N \\
& + (r_\mu \times r_\nu) \cdot N \left( \mu''\nu' - \nu''\mu' \right)
\end{aligned}$$

Escrevendo essa relação em termos dos símbolos de *Christoffel* e usando a Eq. (3.41), para o termo  $(r_\mu \times r_{\mu\mu}) \cdot N$ , tem-se:

$$\begin{aligned}
(r_\mu \times r_{\mu\mu}) \cdot N &= \frac{(r_\mu \times r_{\mu\mu}) \cdot (r_\mu \times r_\nu)}{\sqrt{EG - F^2}} \\
&= \frac{(r_\mu \cdot r_\mu) \cdot (r_{\mu\mu} \cdot r_\nu) - (r_\mu \cdot r_\nu) \cdot (r_\mu \cdot r_{\mu\mu})}{\sqrt{EG - F^2}}
\end{aligned}$$

escrevendo em função dos coeficientes da primeira forma fundamental e usando os símbolos  $[ij, k]$ :

$$(r_\mu \times r_{\mu\mu}) \cdot N = \frac{E [11, 2] - F [11, 1]}{\sqrt{EG - F^2}}$$

ou ainda em função dos símbolos  $\Gamma_{jk}^i$  escreve-se;

$$(r_\mu \times r_{\mu\mu}) \cdot N = \Gamma_{11}^2 \sqrt{EG - F^2}$$

Fazendo esse procedimento para todos os outros termos, a curvatura tangencial é dada pela expressão:

$$\begin{aligned}
k_g = & \left[ \Gamma_{11}^2 \mu'^3 + (2\Gamma_{12}^2 - \Gamma_{11}^1) \mu'^2\nu' + (\Gamma_{22}^2 - 2\Gamma_{12}^1) \mu'\nu'^2 - \Gamma_{22}^1 \nu'^3 \right. \\
& \left. + u'\nu'' - \mu''\nu' \right] \sqrt{EG - F^2} \quad (3.84)
\end{aligned}$$

Observa-se que  $k_g$  depende somente dos coeficientes  $E, G, F$ , e de suas derivadas primeiras e de  $\mu', \mu'', \nu'$  e  $\nu''$ , ou seja, a curvatura tangencial é um invariante da superfície. O termo  $\sqrt{EG - F^2}$  é sempre positivo.

Dada a relação para a curvatura tangencial (ou também chamada curvatura geodésica), pode-se encontrar as equações para as curvas geodésicas.

### 3.4.4 As Equações para as Geodésicas

A curva geodésica é definida (em diversas ocasiões) como a distância mais curta entre dois pontos. Uma maneira mais conveniente para é defini-la como as curvas

que possuem curvatura tangencial nula<sup>i</sup> [23, 25].

Seguindo esse raciocínio, linhas retas sobre superfícies são geodésicas desde que o vetor curvatura  $k$  desapareça. Para geodésicas curvas o vetor curvatura deverá coincidir com a curvatura normal. O interessante é que para  $k_g = 0$  os vetores sobre a curva formarão um campo paralelo igual a uma reta no plano.

Fazendo  $k_g = 0$ , a Eq. (3.84) é escrita como:

$$u' \nu'' - \mu'' \nu' = -\Gamma_{11}^2 \mu'^3 - (2\Gamma_{12}^2 - \Gamma_{11}^1) \mu'^2 \nu' + (\Gamma_{22}^2 - 2\Gamma_{12}^1) \mu' \nu'^2 + \Gamma_{22}^1 \nu'^3 \quad (3.85)$$

o acento  $\{'\}$  indica diferenciação em relação ao comprimento de arco, entretanto, essa relação continua válida para a diferenciação em relação a qualquer parâmetro.

Sabe-se que  $\langle v', r_\mu \rangle = 0$  e  $\langle v', r_\nu \rangle = 0$ . Desse modo, de maneira equivalente a Eq. (3.83), escreve-se;

$$(r_{\mu\mu} r_\mu) \mu'^2 + (2r_{\mu\nu} r_\mu) \mu' \nu' + (r_{\nu\nu} r_\mu) \nu'^2 + E\mu'' + F\nu'' = 0 \quad (3.86)$$

e

$$(r_{\mu\mu} r_\nu) \mu'^2 + (2r_{\mu\nu} r_\nu) \mu' \nu' + (r_{\nu\nu} r_\nu) \nu'^2 + F\mu'' + G\nu'' = 0 \quad (3.87)$$

Eliminando os  $\mu''$  e  $\nu''$ , substituindo os produtos escalares por  $[ij, k]$  e usando os símbolos de *Christoffel* a relação obtida é:

$$\frac{d^2\mu}{dl^2} + \Gamma_{11}^1 \left(\frac{d\mu}{dl}\right)^2 + 2\Gamma_{12}^1 \frac{d\mu}{dl} \frac{d\nu}{dl} + \Gamma_{22}^1 \left(\frac{d\nu}{dl}\right)^2 = 0 \quad (3.88)$$

e

$$\frac{d^2\nu}{dl^2} + \Gamma_{11}^2 \left(\frac{d\mu}{dl}\right)^2 + 2\Gamma_{12}^2 \frac{d\mu}{dl} \frac{d\nu}{dl} + \Gamma_{22}^2 \left(\frac{d\nu}{dl}\right)^2 = 0 \quad (3.89)$$

Assim, essas são as equações para as geodésicas de uma superfície. Curvas que satisfazem essas equações e são candidatas a geodésicas devem satisfazer essas equações.

---

<sup>i</sup>A curvatura tangencial ser nula implica que a curva não se dobra em nenhuma das direções da superfície. Para as curvas que satisfazem essa condição, tem-se a distância mais curta entre dois pontos de maneira análoga a uma reta no plano.

# Capítulo 4

## Tensores

O objetivo desse quarto capítulo é apresentar rapidamente o conceito de manifolds e definir tensores, além de apresentar algumas técnicas do cálculo tensorial, de maneira a se formalizar o tensor curvatura de Riemann e posteriormente se comparar com os conceitos previamente discutidos.

### 4.1 Manifolds

Não será feita uma definição formal de *manifolds* (variedade topológica diferenciáveis), entretanto, para se contextualizar o assunto seguinte, isto é, as quantidades denominadas tensores, deve-se discutir, mesmo que de maneira informal, o que vem a ser um *manifold*.

O espaço Euclidiano N-dimensional,  $\mathbb{R}^n$ , é familiar, sendo caracterizado pelo conjunto de  $n$  – *tuple*  $(x^1, x^2, \dots, x^n)$ . Entretanto, quando o interesse está em espaços com curvatura intrínseca, é necessário algo que capture a informação sobre curvatura, além da topologia<sup>a</sup> complicada desse objeto, mas que localmente venha a se parecer com o espaço  $\mathbb{R}^n$ . Pode ser definido então, não formalmente, um *manifold* como “algo” que localmente assemelha-se ao espaço euclidiano N-dimensional [26, 27].

Considere então um *manifold*,  $\mathbb{M}$ , N-dimensional, como um conjunto de pontos que possuem n-coordenadas, dadas por:

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

Essas coordenadas podem ser imaginadas como distâncias ou ângulos.

Dado um manifold, representado pelas coordenadas acima, o interesse agora é definir curvas e superfícies parametricamente. Assim, uma curva é definida como:

$$x^a = x^a(\mu)$$

em que deve-se lembrar; uma curva possui um grau de liberdade, assim, sendo  $\mu$  o parâmetro, pode-se denotar uma curva em um *Manifold* N-dimensional, por N-funções dependentes desse parâmetro:  $(x^1(\mu), x^2(\mu), \dots, x^n(\mu))$ .

---

<sup>a</sup>Topologia em matemática é o estudo da espaços topológicos, no qual permite o estudo da finitude e limitação, além de estudar as propriedades que são conservadas por deformações.

Para uma superfície bidimensional, por exemplo, serão necessários dois parâmetros. De maneira geral, define-se um sub-espço como  $m$ -dimensional ( $m < n$ ), com  $m$  graus de liberdade pela equação paramétrica  $x^a = x^a(\mu^1, \mu^2, \dots, \mu^m)$ .

Um caso particular de subespço são as hiper-superfícies, definidas para  $m = n - 1$ , dada pela equação paramétrica:

$$x^a = x^a(\mu^1, \mu^2, \dots, \mu^{n-1})$$

A partir dessa definição, a superfície bidimensional a ser citada abaixo, é um subespço de  $\mathbb{R}^3$ , com dimensão  $m = n - 1 = 3 - 1 = 2$ , representada por  $\mathbb{S}^2$ .

Deve-se fazer uma outra observação em relação a *manifolds*: Será possível, ter um único sistema de coordenadas para cada ponto do *manifold*? Se for possível o sistema de coordenadas é chamado de não degenerado, caso exista uma indeterminação denomina-se sistema de coordenadas degenerado. Quando esses sistemas são citados, na realidade, o que se está pensando é em “cobrir” o *manifold*, ou fazer um mapeamento [26, 27].

**Exemplo 4.1** *Para mapear uma esfera em um plano, são necessários no mínimo dois sistemas, pois um dos sistemas não cobre um dos pólos (pólo norte, por exemplo) enquanto que o outro não cobre o pólo oposto.*

Desse exemplo vê-se que são necessários dois sistemas não degenerados para mapear a esfera. Para os fins desse texto, se trabalhará com um pedaço do *manifold*, ou seja, com um sistema de coordenadas que cobre apenas uma parte de  $\mathbb{M}$ , o qual denomina-se *patches* de coordenadas.

A teoria de *manifold* fala sobre como ir de um sistema para outro, em uma região que esses *patches* se sobrepõem. Ir de um sistema de coordenadas para outro é o mesmo que dizer transformações de coordenadas e, para isso, foi visto anteriormente<sup>b</sup> que, considerando a transformação:  $x^a$  para  $x^b$ , o Jacobiano [28, 29] deve ser diferente de zero, isto é:

$$J = \left| \frac{\partial x'^a}{\partial x^b} \right| \neq 0$$

Dessa forma podemos definir uma transformação inversa dada por:

$$J = \frac{1}{J'}$$

Com os conceitos prévios sobre *manifolds*, pode-se agora introduzir as quantidades denominadas tensores.

---

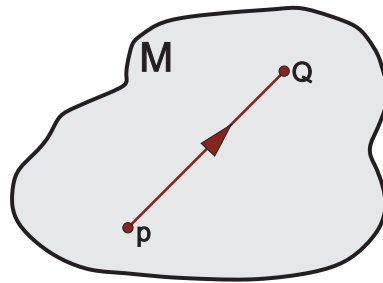
<sup>b</sup>Anteriormente definimos uma matriz de transformação entre as coordenadas velhas para as novas,  $\mathbf{M}$ , Eq.(3.3.1), no qual refere-se diretamente ao Jacobiano e suas propriedades.

## 4.2 Tensores Contravariante e Covariante

As quantidades denominadas tensores, serão definidas a partir de transformações de coordenadas de uma quantidade, que pode ser um vetor, ligando dois pontos em uma vizinhança em um *Manifold*. Assim, a definição será simplesmente matemática, e não se recorrerá a interpretações físicas.

### 4.2.1 Tensor Contravariante

Considere dois pontos,  $P$  e  $Q$ , em uma vizinhança em um *manifold*,  $\mathbb{M}$ , como mostra a Figura (4.1) abaixo:



**Figura 4.1** – Dois pontos em uma vizinhança no Manifold arbitrário, observando que apesar de sua representação plana, não há interesse em cálculo vetorial no plano, pois não trará informações adicionais.

As coordenadas em  $P$  são  $x^i$  e em  $Q$   $x^i + dx^i$ . Portanto, vê-se que o vetor ligado a  $P$  define um deslocamento ou vetor infinitesimal de  $P$  a  $Q$ .

Verificando como ficam as componentes das coordenadas em outro sistema, isto é, realizando uma transformação de coordenadas, escreve-se:

$$dx'^i = \frac{\partial x'^i}{\partial x^j} dx^j \quad (4.1)$$

em que a matriz de transformação é:

$$\left[ \frac{\partial x'^i}{\partial x^j} \right]_P$$

avaliada no ponto  $P$ .

Pode-se então definir um vetor contravariante como uma quantidade que sofre transformação de coordenadas segundo a Eq.(4.1).

Além da forma como essas quantidades se comportam por uma transformação de coordenadas, pode-se ainda definir a ordem de um tensor [29, 30]. Assim, defini-se:

**Definição 4.1** Um tensor de ordem 1 (ou vetor) são as quantidades que sofrem transformação de coordenadas de acordo com:

$$A'^i = \frac{\partial x'^i}{\partial x^j} A^j \quad (4.2)$$

**Definição 4.2** *Tensores de ordem 2 se transformam de acordo com:*

$$T'^{ij} = \frac{\partial x'^i}{\partial x^k} \frac{\partial x'^j}{\partial x^l} T^{kl} \quad (4.3)$$

Os tensores contravariantes de ordem maiores podem ser definidos de forma análoga. Além disso, deve-se observar que as quantidades  $x'^i$ ,  $x'^j$ , etc, são campos vetoriais (para ordem 1) ou campos tensoriais, representados por  $X'^i$ ,  $X'^j$ , etc; para ordens maiores. Assim, os campos tensoriais em alguma região do *manifold* possuem a mesma ordem para cada ponto da região.

Temos também tensores de ordem menor, os chamados de ordem zero:

**Definição 4.3** *Um tensor de ordem zero é chamado escalar e transforma-se de acordo com:*

$$\Phi' = \Phi$$

*assim, é também chamado de ou invariante escalar.*

Foram definidos tensores contravariantes e o invariante escalar. Na próxima seção será definido os tensores covariantes.

## 4.2.2 Tensor Covariante

Considerando uma função em que todo ponto no *manifold* produz um número real,  $\Phi = \Phi(z^i)$ , e assumindo que a função seja contínua e diferenciável, quando se faz uma mudança de um sistema de coordenadas para outro, a função transforma-se de acordo com [30, 32]:

$$\frac{\partial \Phi}{\partial x'^j} = \frac{\partial \Phi}{\partial x^i} \frac{\partial x^i}{\partial x'^j} \quad (4.4)$$

permutando os índices livre e mudos, pode-se escrever:

$$\frac{\partial \Phi}{\partial x'^i} = \frac{\partial x^j}{\partial x'^i} \frac{\partial \Phi}{\partial x^j} \quad (4.5)$$

Dessa transformação defini-se:

**Definição 4.4** *Um tensor covariante de rank (ordem) 1, é uma quantidade que se transforma por mudança de coordenadas de acordo com:*

$$A'_i = \frac{\partial x^j}{\partial x'^i} A_j \quad (4.6)$$

enquanto que um tensor de rank 2, transforma-se;

$$T'_{ij} = \frac{\partial x^k}{\partial x'^i} \frac{\partial x^l}{\partial x'^j} T_{kl} \quad (4.7)$$

De maneira análoga define-se tensores para ordens maiores.

Existe ainda os chamados tensores mistos. Considerando um tensor de ordem três misto, este transforma-se de acordo com:

$$T'^i_{jk} = \frac{\partial x'^i}{\partial x^l} \frac{\partial x^m}{\partial x'^j} \frac{\partial x^n}{\partial x'^k} T^l_{mn} \quad (4.8)$$

Como se vê, pela definição, o nome tensor misto deve-se ao fato de as componentes se transformarem de forma contravariante e covariante.

Um tensor misto que possui *rank*  $p$  contravariante e  $q$  covariante, é dito tendo valência  $(p, q)$ .

### 4.2.3 Simetria e Anti-Simetria

Um tensor é dito simétrico se:

$$A^{ij} = A^{ji}$$

enquanto que, se ao se permutar os índices o resultado for:

$$A^{ij} = -A^{ji}$$

é dito anti-simétrico.

Todo tensor pode ser decomposto em partes simétricas e anti-simétricas. Dessa forma, um tensor de ordem 2 pode ser decomposto como:

$$A^{ij} = \frac{1}{2} (A^{ij} + A^{ji}) + \frac{1}{2} (A^{ij} - A^{ji}) \quad (4.9)$$

em que o termo  $\frac{1}{2} (A^{ij} + A^{ji})$  é a parte simétrica e a parte anti-simétrica é dada por  $\frac{1}{2} (A^{ij} - A^{ji})$ .

## 4.3 Derivada de Tensores

O objetivo dessa seção é encontrar operações diferenciais que sejam tensoriais, ou seja, como devem ser as derivadas dessas quantidades denominadas tensores e como calculá-las. Será visto que; com uma superfície com curvatura intrínseca, as derivadas de tensores não respondem as definições usuais.

Para isso, considera-se inicialmente a quantidade:

$$A'^i = \frac{\partial x'^i}{\partial x^j} A^j \quad (4.10)$$

diferenciando a equação anterior em relação a quantidade  $x'^k$ , tem-se:

$$\partial'_k A'^i = \frac{\partial}{\partial x'^k} \left( \frac{\partial x'^i}{\partial x^j} A^j \right)$$

como;

$$\partial'_k = \frac{\partial x^l}{\partial x'^k} \frac{\partial}{\partial x^l}$$

o resultado dessa operação será:

$$\begin{aligned} \partial'_k A'^i &= \frac{\partial x^l}{\partial x'^k} \frac{\partial}{\partial x^l} \left( \frac{\partial x'^i}{\partial x^j} A^j \right) \\ &= \frac{\partial x'^i}{\partial x^j} \frac{\partial x^l}{\partial x'^k} \partial_l A^j + \frac{\partial^2 x'^i}{\partial x^j \partial x^l} A^j \end{aligned}$$

Analisando essa última relação, percebe-se que não se encontra uma relação diferencial tensorial, após se realizar a derivada um tensor de maneira ordinária [29]. O primeiro termo do lado direito estando sozinho seria a derivada de uma quantidade tensorial, entretanto, esse vem acompanhado de um termo adicional (segundo termo do lado direito), o qual impede o caráter tensorial.

A derivada parcial de uma quantidade tensorial então não é considerada tensorial. Uma razão para isso ocorrer vêm do fato que; ao se diferenciar, por exemplo, uma quantidade vetorial, esse processo envolve a comparação de quantidades avaliadas em um mesmo ponto, entretanto, ao se calcular a derivada parcial de um tensor, como foi feito, as quantidades envolvidas não foram avaliadas em um mesmo ponto.

Para diferenciar um tensor será necessário então encontrar uma forma que leve em consideração as matrizes de transformação avaliadas em um mesmo ponto [26, 32].

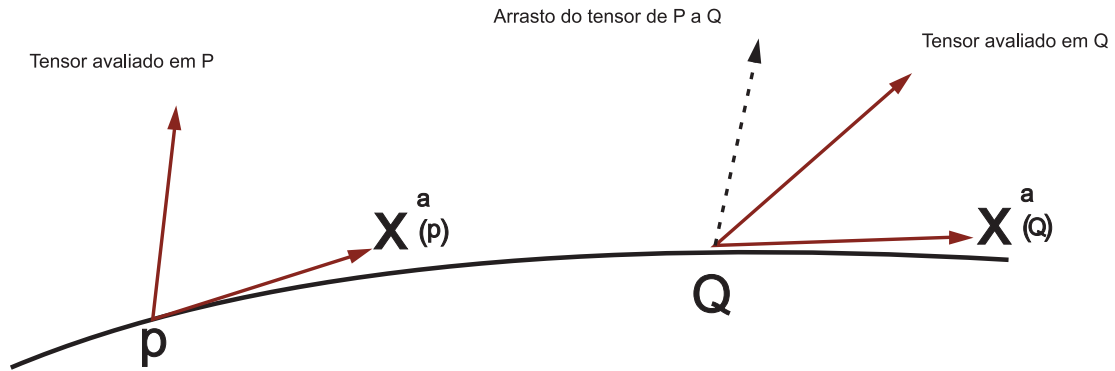
### 4.3.1 A Derivada de Lie

A idéia principal para se derivar um tensor será considerar um transporte da quantidade avaliada de um ponto  $P$ , por exemplo, até um ponto  $Q$ , no qual existe um outro tensor avaliado, e desse modo definir a diferenciação em relação a diferença entre os tensores em  $Q$  [26, 28].

Sem perder a generalidade, considerando um tensor de *rank* 1,  $A^i$ , pode-se escrever a transformação:

$$x'^i = x^i + \delta\mu A^i(x) \quad (4.11)$$

em que  $\delta\mu$  é pequeno. Essa é a transformação da quantidade no ponto  $P$  com coordenadas  $x^i$  para um ponto vizinho  $Q$ .



**Figura 4.2** – Tensores avaliados em pontos distintos em uma vizinhança da variedade topológica diferenciável, em que se representa o “arrasto” do tensor de um ponto  $Q$  a  $p$ , no qual as quantidades  $x^a(p)$  e  $x^a(Q)$ , é uma curva sobre a variedade, no qual estão os pontos. A partir dessa curva pode-se construir vetores tangentes,  $\frac{dx^a}{d\mu}$ , permitindo, ao se avaliar todas as curvas congruentes, a determinação de um campo tensorial,  $X^a(\mu)$ . Figura adaptada de [26]

Diferenciando a transformação, Eq. (4.11), em relação a  $x^j$ , pode-se escrever a relação:

$$\frac{\partial x'^i}{\partial x^j} = \delta_j^i + \delta\mu \partial_j A^i \quad (4.12)$$

Foi considerado apenas a transformação das coordenadas com um incremento  $\delta\mu$  em  $A^i$ . Deve-se considerar agora o campo tensorial  $T^{ij}$  em  $P$  transportado para  $Q$  de tal forma que essas quantidades em função das coordenadas serão em  $P$  dadas por;  $T^{ij}(x)$  e no ponto  $Q$  por  $T^{ij}(x')$ .

Da lei de transformação tensorial obtém-se:

$$\begin{aligned} T'^{ij}(x') &= \frac{\partial x'^i}{\partial x^k} \frac{\partial x'^j}{\partial x^l} T^{kl}(x) \\ &= (\delta_i^k + \delta\mu \partial_k A^i(x)) (\delta_l^j + \delta\mu \partial_l A^j(x)) T^{kl}(x) \\ &= T^{ij}(x) + \left( \partial_l A^j T^{il}(x) + \partial_k A^i T^{kj}(x) \right) \delta\mu + O(\delta\mu^2) \end{aligned} \quad (4.13)$$

Pelo teorema de Taylor tem-se:

$$T^{ij}(x') = T^{ij}(x^k + \delta\mu A^k(x))$$

que em primeira ordem fornece:

$$T^{ij}(x') = T^{ij}(x) + \delta\mu A^k \partial_k T^{ij}(x) \quad (4.14)$$

Assim, defini-se a derivada de Lie de uma quantidade tensorial  $T^{ij}$  em relação a  $A^i$  como:

$$L_A T^{ij} = \lim_{\delta\mu \rightarrow 0} \frac{T^{ij}(x) - T^{ij}(x')}{\delta\mu} \quad (4.15)$$

A expressão acima, ao contrário da diferenciação feita na seção anterior, envolve a comparação das quantidades em um mesmo ponto. Desse modo, substituindo as Eqs. (4.13) e (4.14) na definição, Eq. (4.15) encontra-se:

$$L_A T^{ij} = A^k \partial_k T^{ij} - T^{ik} \partial_k A^j - T^{kj} \partial_k A^i \quad (4.16)$$

Dentre as propriedades da derivada de Lie, destaca-se a que diz respeito a preservação da valência de um tensor. Por exemplo, considerando um tensor de ordem  $n$ , a sua diferenciação pela relação anterior resultará em um tensor de mesma ordem.

**Propriedade 4.1** *Preservando a Valência:*

$$L_x T^{pq} = A^{pq} \quad (4.17)$$

*A derivada de um tensor do tipo  $(p,q)$  resulta em um tensor com mesma valência  $(p,q)$ .*

Além da propriedade citada, destaca-se uma segunda:

**Propriedade 4.2** *Derivada de um Campo Escalar:*

$$L_x \phi = X\phi = X^a \partial_a \phi$$

### 4.3.2 A Derivada Covariante

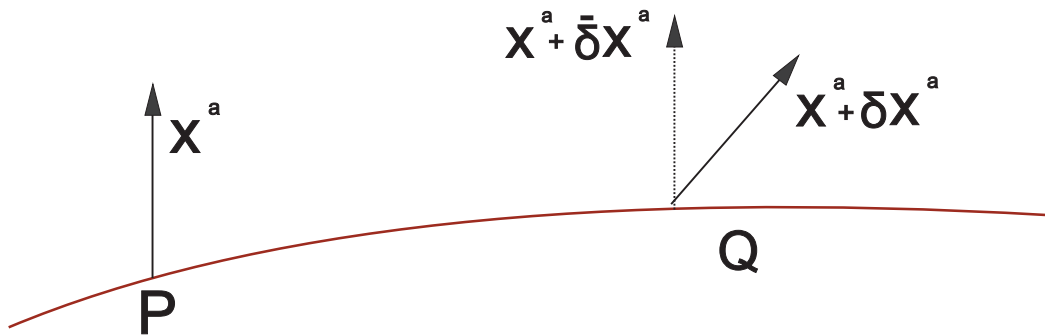
A derivada de Lie foi definida considerando-se um pequeno incremento no campo tensorial quando fazia-se uma mudança, nas coordenadas, indo de um ponto a outro em uma vizinhança da variedade topológica diferenciável. Uma outra maneira de diferenciar tensores, a qual é conhecida por derivada covariante, no qual é considerado o transporte do próprio campo tensorial do ponto  $P$  até  $Q$ . Considerando um campo contravariante avaliado em  $P$  com coordenadas  $x^i$  na vizinhança de  $Q$  dado por  $x' + \delta x^i$ , então pelo teorema de Taylor [26, 29, 30]:

$$A^i(x + \delta x) = A^i(x) + \delta x^j \partial_j A^i$$

no qual considera-se apenas os termos em primeira ordem. O segundo termo pode ser escrito na forma:

$$\delta A^i(x) = \delta x^j \partial_j A^i = A^i(x + \delta x) - A^i(x)$$

O resultado acima não é tensorial pelo mesmo motivo que foi discutido ao se definir a derivada de Lie, isto é, a diferença dada pela equação anterior é avaliada em pontos distintos, o que torna necessário novamente uma modelagem adequada de tal maneira que as matrizes de transformação sejam avaliadas em um mesmo ponto, permitindo construir uma definição de derivada.



**Figura 4.3** – Representação para o transporte paralelo do tensor do ponto  $P$  ao ponto  $Q$ , observando que essa representação não está em escala. Figura adaptada de [26].

Considerando um campo tensorial (ou vetorial) avaliado em  $Q$  que de alguma maneira é paralelo ao vetor  $A^i$  em  $P$ . Desse modo, assumindo que o vetor paralelo difere apenas por uma quantidade pequena  $\bar{\delta}A^i(x)$ , os vetores no ponto  $Q$  são dados por:  $A^i(x) + \bar{\delta}A^i(x)$ , paralelo ao vetor em  $P$  e,  $A^i(x) + \delta A^i(x)$  que difere na orientação por uma quantidade pequena.

A diferença entre esses campos, de forma tensorial, é dada então por:

$$A^i(x) + \delta A^i(x) - [A^i(x) + \bar{\delta}A^i(x)] = \delta A^i(x) - \bar{\delta}A^i(x)$$

Observa-se que a quantidade  $\bar{\delta}A^i(x)$  desaparece quando  $A^i$  e  $\delta A^i(x)$  desaparecem. Assim, a quantidade  $\bar{\delta}A^i(x)$  pode ser escrita como;

$$\bar{\delta}A^i(x) = -\Gamma_{jk}^i A^j \delta x^k$$

em que o fator  $\Gamma_{jk}^i A^j$  é devido a linearidade [32]. Essa relação diz respeito ao transporte paralelo do campo tensorial sobre a variedade diferenciável.

A derivada covariante é então definida pelo processo limite dado por:

$$\nabla_k A^i = \lim_{\delta x^k \rightarrow 0} \frac{1}{\delta x^k} \{A^i(x + \delta x) - [A^i(x) + \bar{\delta}A^i(x)]\} \quad (4.18)$$

Resolvendo o limite encontra-se:

$$\nabla_k A^i = \partial_k A^i + \Gamma_{jk}^i A^j \quad (4.19)$$

A exigência para que a relação seja um tensor implica que a quantidade  $\Gamma_{jk}^i$  deve-se transformar de acordo com:

$$\Gamma'_{jk}{}^i = \frac{\partial x'^i}{\partial x^l} \frac{\partial x^m}{\partial x'^j} \frac{\partial x^n}{\partial x'^k} \Gamma_{mn}{}^l + \frac{\partial x^k}{\partial x'^j} \frac{\partial x^m}{\partial x'^k} \frac{\partial^2 x'^i}{\partial x^l \partial x^m} \quad (4.20)$$

Observando essa última relação vê-se que a quantidade  $\Gamma_{jk}^i$  não é um tensor, pois o segundo termo do lado direito retira o caráter tensorial dessa relação. Esse termo, entretanto, revela que essa transformação é linear mas não homogênea.

Um ponto importante é que qualquer quantidade que se transforma de acordo com essa última relação é conhecida como conexão afim, conexão, ou simplesmente afinidade. Como a derivada covariante foi definida por transformações de ponto, ou seja, a mudança de  $P$  a  $Q$  é feita ponto a ponto, quando se fala em conexão afim, implicitamente refere-se a transformações ponto a ponto [26, 28, 32].

Um outro ponto é que as conexões podem ser escritas em função da métrica, como será visto na seções seguintes e vale observar que os *símbolo de Christoffel*, apresentado no Capítulo 3, possui as propriedades de transformação discutidas acima. Um outro ponto que deve ser evidenciado diz respeito a possibilidade de  $i, j, k$  poderem assumir valores (1, 2, 3) ou números maiores. A escolha das possibilidades que os índices podem assumir dependerão do número de dimensões da superfície.

### 4.3.3 Derivada Absoluta

Considerando um tensor misto  $T_{j\dots}^i$ , pode-se considerar a derivada covariante e se introduzir a notação [26]:

$$\nabla_A T_{j\dots}^i = A^k \nabla_k T_{j\dots}^i \quad (4.21)$$

em que  $\nabla_A$  é a contração da derivada covariante com a quantidade tensorial  $A$ . No início desse capítulo, foi visto que um campo contravariante determinava um local de curvas dado por:  $x^i = x^i(\mu)$ , de tal forma que o campo tangente é:

$$\frac{dx^i}{d\mu} = A^i \quad (4.22)$$

Defini-se a derivada absoluta de um tensor ao longo de uma curva  $C$  por:

$$\frac{D}{D\mu} T_{j\dots}^i = \nabla_A T_{j\dots}^i$$

Considerando um campo vetorial tangente a curva  $C$  dado por  $\frac{dx^i}{d\mu} = V^i$  e um campo  $A^i(\mu_0)$ , de tal forma que o vetor  $V^i$  possa ser transportado paralelamente até  $A^i$ , então, fazendo uso da Eq.(4.21), a derivada absoluta é:[26, 28]

$$\begin{aligned}\frac{D}{D\mu}A^j(\mu) &= A^i\nabla_i A^j(\mu) \\ &= \frac{dx^i}{d\mu}(\partial_i A^j + \Gamma_{ki}^j A^k)\end{aligned}$$

ou:

$$\frac{D}{D\mu}A^j(\mu) = V^i(\partial_i A^j + \Gamma_{ki}^j A^k) \quad (4.23)$$

O transporte será paralelo se:

$$V^i(\partial_i A^j + \Gamma_{ki}^j A^k) = 0 \quad (4.24)$$

isto é, se a derivada absoluta for nula.

## 4.4 Tensor Métrico

Considerando a transformação de um conjunto de coordenadas  $x^i$  para as novas  $x'^i$  [30]. As diferenciais obedecem a lei de transformação dada pela Eq.(4.1), a qual pode ser escrita como:

$$dx'^i = E_j dx^j$$

Chamando os  $dx^i$  de  $dr$  pode-se reescrever a relação anterior de forma a se obter os  $E_j$ . Assim:

$$E_j = \frac{dr}{dx^j}$$

Esses não necessariamente são unitários, assim sabendo que  $e_i = h_i \frac{dr}{dx^i}$  (sem somatório), pode-se escrever a relação anterior como:

$$E_i = h_i e_i$$

Para vetores contravariantes, a lei de transformação Eq.(4.2), pode ser escrita como:

$$A'^i = A^j E_j$$

Para as quantidades covariantes, lembrando que a matriz de transformação é a inversa das transformações contravariantes, pode-se escrever:

$$A'^i = A_j E^j$$

O comprimento de arco é dado por  $dl^2 = dr \cdot dr$ , logo:

$$\begin{aligned} dl^2 &= (E^j dx^j)^2 \\ &= (E^i \cdot E^j) dx^i dx^j \end{aligned} \quad (4.25)$$

Com esse resultado definimos uma métrica por;

$$g_{ij} = (E^i \cdot E^j) \quad (4.26)$$

O comprimento de arco então é escrito de uma forma já utilizada no texto:

$$dl^2 = g_{ij} dx^i dx^j$$

e com o mesmo procedimento para a transformação inversa se obtêm  $g^{ij}$ , o que implica como visto no Capítulo 3 em uma delta de Kronecker. Escrevendo a expressão anterior explicitamente e lembrando que o comprimento de arco,  $dl^2$ , é um invariante escalar (o elemento de arco tomado o produto interno com ele mesmo gera um escalar), então:

$$g'_{ij} dx'^i dx'^j = g_{ij} dx^i dx^j$$

considerando as transformações de coordenadas, encontra-se:

$$g'_{ij} dx'^i dx'^j = g'_{ij} \frac{\partial x^i}{\partial x^k} \frac{\partial x^j}{\partial x^l}$$

igualando os termos do lado direito dessa ultima equação com os da Eq.(4.27) obtém-se:

$$g_{ij} = \frac{\partial x^i}{\partial x^k} \frac{\partial x^j}{\partial x^l} g'_{ij} \quad (4.27)$$

esse resultado mostra que a métrica é um tensor de ordem 2 e como foi visto possui um carácter especial de “abaixar” ou “levantar” índices.

Considerando o tensor métrico, o símbolo de *Christoffel* pode ser escrito em função das derivadas de  $g^{ij}$ . Desse modo, diferenciando a Eq. (4.26) pode-se escrever:

$$\Gamma_{ikl} = \frac{1}{2} \left( \frac{\partial g_{im}}{\partial x^k} + \frac{\partial g_{mk}}{\partial x^i} - \frac{\partial g_{ki}}{\partial x^m} \right)$$

o resultado anterior pode agora ser reescrito como:

$$\Gamma_{ik}^l = \frac{1}{2} g^{lm} \left( \frac{\partial g_{im}}{\partial x^k} + \frac{\partial g_{mk}}{\partial x^i} - \frac{\partial g_{ki}}{\partial x^m} \right) \quad (4.28)$$

A partir da relação anterior, (Eq.4.28), pode-se encontrar os valores do símbolo  $\Gamma_{ik}^l$  calculando os coeficientes da métrica e conseqüentemente, para um espaço métrico, a derivada covariante que dependente conexão afim pode ser determinada.

## 4.5 Geodésicas

Considerando o elemento de arco dado pela Eq.(4.27) de uma curva  $C$ , em função de um parâmetro  $\mu$ . Pode-se escrever [26]:

$$\left( \frac{dl^2}{d\mu} \right)^2 = g_{ij} \frac{dx^i}{d\mu} \frac{dx^j}{d\mu} \quad (4.29)$$

O comprimento de arco entre dois pontos será dado por:

$$l = \int_P^Q dl = \int_P^Q \sqrt{g_{ij} \frac{dx^i}{d\mu} \frac{dx^j}{d\mu}} d\mu \quad (4.30)$$

A geodésica, como já definida, é o menor caminho entre dois pontos. Desse modo, pelo princípio de variação pode-se obter a curva de menor comprimento entre dois pontos. Assim:

$$\delta \int_P^Q dl = \frac{1}{2} \int_P^Q g_{ij} \frac{d^2 x^j}{d\mu^2} + [ij, k] \frac{dx^j}{d\mu} \frac{dx^k}{d\mu} \delta dl = 0 \quad (4.31)$$

para que essa relação seja nula, o integrando deve se anular, pois o elemento de arco é considerado como não nulo. Desse modo:

$$g_{ij} \frac{d^2 x^j}{d\mu^2} + [ij, k] \frac{dx^j}{d\mu} \frac{dx^k}{d\mu} = 0 \quad (4.32)$$

é a equação para a geodésica. Um ponto interessante diz respeito foto dessa curva estar parametrizada em função do parâmetro natural.

A Eq.(4.32) pode ser escrita ainda em função dos símbolos de *Christoffel* de segundo tipo. Para isso, fazer uma multiplicação por  $g^{ij}$ . Desse modo, pode-se escrever:

$$\frac{d^2 x^j}{d\mu^2} + \Gamma_{jk}^i \frac{dx^j}{d\mu} \frac{dx^k}{d\mu} = 0 \quad (4.33)$$

## 4.6 Comutatividade Da Derivada Covariante E O Tensor De Riemann

O objetivo dessa seção é investigar a propriedade de comutação da derivada covariante e a partir das relações obtidas definir o tensor curvatura.

Uma condição suficiente para que as derivadas segundas parciais comutem, pode ser expressa por [26]:

$$\frac{\partial^2 f}{\partial x \partial y} = \frac{\partial^2 f}{\partial y \partial x}$$

é que a função  $f(x, y)$  seja da classe  $C^2$ , isto é, que pelo menos as derivadas de segunda ordem sejam contínuas. Entretanto, essa condição não é suficiente para garantir que um diferenciação covariante de segunda ordem comute. Desse modo, se a derivada covariante pode não comutar, é necessário deduzir as condições para que isso ocorra.

Considerando um vetor arbitrário  $A_i$ , e utilizando a notação para simplificar:

$$\nabla_j A_i = A_{i;j} \quad e \quad \nabla_k (\nabla_j A_i) = A_{i;jk}$$

Calculando a derivada covariante de ambos os lados, condição necessária para que as derivadas comutem é  $A_{i;jk} = A_{i;kj}$ .

Considerando a derivada de  $A_i$  em relação a  $x^j$ ,

$$A_{i;j} = \frac{\partial A_i}{\partial x^j} + \Gamma_{ij}^r A_r \quad (4.34)$$

e a derivada em relação a  $x^k$ :

$$A_{i;jk} = \frac{\partial A_{i;j}}{\partial x^k} + \Gamma_{ik}^r A_{r;j} - \Gamma_{jk}^r A_{i;r} \quad (4.35)$$

Permutando os índices, da relação anterior, tem-se:

$$A_{i;kj} = \frac{\partial A_{i;k}}{\partial x^j} + \Gamma_{ij}^r A_{r;k} - \Gamma_{kj}^r A_{i;r} \quad (4.36)$$

Utilizando a condição para a comutatividade da derivada covariante:

$$\begin{aligned} A_{i;jk} &= A_{i;kj} \\ A_{i;jk} - A_{i;kj} &= 0 \\ \frac{\partial A_{i;j}}{\partial x^k} + \Gamma_{ik}^r A_{r;j} - \Gamma_{jk}^r A_{i;r} - \frac{\partial A_{i;k}}{\partial x^j} + \Gamma_{ij}^r A_{r;k} - \Gamma_{kj}^r A_{i;r} &= 0 \end{aligned}$$

o que leva a:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial x^k} \left( \frac{\partial A_i}{\partial x^j} - \Gamma_{ij}^s A_s \right) - \frac{\partial}{\partial x^j} \left( \frac{\partial A_i}{\partial x^k} - \Gamma_{ik}^s A_s \right) - \Gamma_{ik}^r \left( \frac{\partial A_r}{\partial x^j} - \Gamma_{rj}^s A_s \right) \\ + \Gamma_{ij}^r \left( \frac{\partial A_r}{\partial x^k} - \Gamma_{rk}^s A_s \right) = 0 \end{aligned}$$

Simplificando a relação anterior, encontra-se:

$$\left[ \frac{\partial \Gamma_{ik}^s}{\partial x^j} - \frac{\partial \Gamma_{ij}^s}{\partial x^k} + \Gamma_{ik}^r \Gamma_{rj}^s - \Gamma_{ij}^r \Gamma_{rk}^s \right] A_s = 0 \quad (4.37)$$

Reescrevendo o termo entre parenteses da equação acima;

$$R_{ijk}^s = \frac{\partial \Gamma_{ik}^s}{\partial x^j} - \frac{\partial \Gamma_{ij}^s}{\partial x^k} + \Gamma_{ik}^r \Gamma_{rj}^s - \Gamma_{ij}^r \Gamma_{rk}^s \quad (4.38)$$

O resultado obtido é um tensor de ordem 4, com 256 componentes, conhecido como tensor de Riemann ou tensor curvatura.

Pode-se observar que a Eq. (4.37) será nula somente se o tensor curvatura for identicamente nulo, pois o vetor  $A_s$  é arbitrário. Esse resultado é interessante, pois, quando o tensor de Riemann não é identicamente nulo, as derivadas não irão comutar e existirá uma curvatura associada ao espaço, o qual pertence  $A_s$ .

O tensor de Riemann totalmente covariante pode ser obtido a partir da contração com o tensor métrico,

$$R_{ijkl} = g_{ls} R_{ijk}^s \quad (4.39)$$

o qual possui as seguintes propriedades algébricas [26, 28, 32];

**Propriedade 4.3** *Antissimetria:*  $R_{ijkl} = -R_{jikl} = -R_{ijlk}$ .

**Propriedade 4.4** *Simetria pela troca do par de índices:*  $R_{ijkl} = R_{klij}$ .

**Propriedade 4.5** *Periodicidade:*  $R_{ijkl} + R_{iljk} + R_{iklj} = 0$ .

## 4.7 O tensor de Ricci e o Escalar de Curvatura

O tensor de Ricci [31, 28] é definido pela contração do tensor de Riemann totalmente covariante com o tensor métrico;

$$R_{ij} = g^{kl} R_{ikjl} \quad (4.40)$$

e a partir da propriedade 4.3, apresentada na seção (4.6), tem-se que o tensor de Ricci é simétrico:

$$R_{ij} = R_{ji} \quad (4.41)$$

A partir da Eq. (4.40), pode-se construir um escalar a partir da contração:

$$R = g^{ij} R_{ij} = g^{ij} g^{kl} R_{ikjl} \quad (4.42)$$

O escalar encontrado é conhecido como escalar de Ricci ou de curvatura.

A quantidade escalar obtida a partir dessa contração fornece o valor da curvatura intrínseca de uma determinada superfície, assim como a curvatura de Gauss. Dessa forma, para encontrar a curvatura de uma esfera bidimensional imersa em um espaço euclidiano, deve-se determinar o escalar de Ricci. Para esse exemplo em particular, o escalar irá fornecer o resultado:

$$R = \frac{2}{r^2} \quad (4.43)$$

em que  $r$  é o raio da esfera de superfície bidimensional.

## 4.8 As Equações da Superfície Revisitadas

Nessa seção, apenas se reescreve as equações diferenciais obtidas para uma superfície em uma notação tensorial<sup>c</sup>, facilitando assim a compreensão dos conceitos apresentados até o presente capítulo.

Reescrevendo as Eqs.(3.50) como:

$$r_{ik} = \Gamma_{ik}^l r_l + b_{ik} r_3 \quad (4.44)$$

em que  $r_3$  é o vetor normal a superfície,  $N$  (definido na Seção 3.3.4),  $b_{ik}$  são os coeficientes da segunda forma fundamental e  $r_l$  assume os valores das derivadas em relação a  $\mu$  e  $\nu$ .

Novamente, utilizando o mesmo procedimento da seção (3.4.1) para determinar os coeficientes  $\Gamma_{ik}^l$ , calcula-se o produto interno com  $r_m$ , de maneira a encontrar:

$$r_{ik} \cdot r_m = \Gamma_{ik}^l (r_l \cdot r_m) + b_{ik} (r_3 \cdot r_m) \quad (4.45)$$

em que a notação para o produto interno, agora será apenas  $\{.\}$ . Como  $r_3 \perp r_m \implies r_3 \cdot r_m = 0$ . O produto interno entre  $r_l \cdot r_m$ , como visto anteriormente, são os coeficientes da primeira forma fundamental.

---

<sup>c</sup>A notação tensorial poderia ter sido utilizada sem fazer referência a distinção entre covariante e contravariante. Assim, esse tópico poderia ter sido apresentado antes mesmo de se definir o Tensor e o Escalar de curvatura. Entretanto, primeiramente encontrou-se as equações de forma explícita, facilitando a compreensão geométrica e agora reescreve-se as equações do Capítulo 3 conciliando-as com o Capítulo 4[23].

Sendo a matriz da forma  $I$  dada por  $\mathbb{G}$ , os coeficientes da métrica serão  $g_{ij}$ . Portanto, a equação (4.45) fica:

$$r_{ik} \cdot r_m = \Gamma_{ik}^l g_{lm} \quad (4.46)$$

Como  $\mathbb{G}$  é dada por:

$$\mathbb{G} = \begin{pmatrix} g_{11} & g_{12} \\ g_{21} & g_{22} \end{pmatrix}$$

e sua inversa por:

$$\mathbb{G}^{-1} = \frac{1}{\det \mathbb{G}} \begin{pmatrix} g_{11} & -g_{12} \\ -g_{21} & g_{22} \end{pmatrix}$$

Observa-se que o determinante de  $\mathbb{G}$  é positivo e como nesse caso a matriz da primeira forma é simétrica, logo, a inversa também é simétrica, e:

$$\mathbb{G}\mathbb{G}^{-1} = \mathbf{1}$$

em que  $\mathbf{1}$  é a matriz identidade. Desse modo:

$$a_i^k = \sum_{j=1}^2 g_{ij} g^{jk} = \delta_i^k = \begin{cases} 1, & i = k \\ 0, & i \neq k \end{cases}$$

Multiplicando pela direita e pela esquerda a equação (4.46) por  $g^{lm}$ , que é a inversa de  $g_{lm}$ , tem-se a relação:

$$\Gamma_{ik}^l = g^{lm} r_{ik} \cdot r_m \quad (4.47)$$

Falta agora avaliar os símbolos de *Christoffel*<sup>d</sup>. Partindo da relação que relaciona os coeficientes da métrica com os vetores tangentes à superfície,  $g_{im} = r_i \cdot r_m$ , e diferenciando em relação a um parâmetro  $u$ :

$$\begin{aligned} \frac{\partial g_{im}}{\partial u^k} &= r_{ik} \cdot r_m + r_i \cdot r_{mk} \\ \frac{\partial g_{mk}}{\partial u^i} &= r_{mi} \cdot r_k + r_m \cdot r_{ki} \\ \frac{\partial g_{ki}}{\partial u^m} &= r_{km} \cdot r_i + r_k \cdot r_{im} \end{aligned} \quad (4.48)$$

Somando as duas primeiras relações e subtraindo a terceira, encontra-se:

<sup>d</sup>Os símbolos de Christoffel nessa representação é conhecido como notação de *Cartan*

$$\Gamma_{ikm} = r_{ik} \cdot r_m = \frac{1}{2} \left( \frac{\partial g_{im}}{\partial u^k} + \frac{\partial g_{mk}}{\partial u^i} - \frac{\partial g_{ki}}{\partial u^m} \right) \quad (4.49)$$

Ainda, da equação (4.47), pode-se escrever<sup>e</sup>:

$$\Gamma_{ik}^l = g^{lm} \Gamma_{ikm} \quad (4.50)$$

### 4.8.1 Equações de Weingarten

Multiplicando as equações da superfície, Eqs. (3.50), por  $r_j$  e decompondo o vetor normal nas duas direções da superfície, pode-se escrever;

$$r_{3i} \cdot r_j = -b_i^k g_{kj} \quad (4.51)$$

em que  $r_{3i} = -b_i^k r_k$ . Como  $r_3 \cdot r_j = 0$ , diferenciando em relação a  $i$ , têm-se:

$$r_{3i} \cdot r_j + r_3 \cdot r_{ij} = 0 \quad \implies \quad r_{3i} \cdot r_j + b_{ij} = 0$$

em que  $r_3 \cdot r_{ij} = b_{ij}$  são os coeficientes da forma *II*. Logo:

$$r_{3i} \cdot r_j = -b_{ij} \quad (4.52)$$

Observando a relação (4.51), então:

$$b_{ij} = b_i^k g_{kj} \quad (4.53)$$

Assim, tem-se os coeficientes determinados para as equações de *Weingarten*.

### 4.8.2 Equações de Codazzi e o Teorema de Egregium

Das equações de Gauss pode-se determinar as equações de *Codazzi*. Considerando a Eq. (4.44) e diferenciando em relação a  $u^j$ . Assim:

$$\begin{aligned} r_{ikj} &= \frac{\partial \Gamma_{ik}^l}{\partial u^j} r_j + \Gamma_{ik}^l r_{lj} + b_{ikj} r_3 + b_{ik} r_j \\ &= \frac{\partial \Gamma_{ik}^l}{\partial u^j} r_j + \Gamma_{ik}^l \Gamma_{lj}^n r_n + \Gamma_{ik}^l b_{lj} r_3 + b_{ikj} r_3 - b_{ik} b_j^n r_n \\ &= r_m \left[ \frac{\partial \Gamma_{ik}^n}{\partial u^j} + \Gamma_{ik}^l \Gamma_{lj}^n - b_{ik} b_j^n \right] + r_3 \left[ \Gamma_{ik}^l b_{lj} + b_{ikj} \right] \end{aligned} \quad (4.54)$$

---

<sup>e</sup>Percebe-se que os coeficientes  $g^{lm}$  levantam índices. Como apresentado no Capítulo 4, percebe-se que existem componentes contravariantes e covariantes. Observando a construção explícita no Capítulo 3, será possível perceber essa propriedade.

Trocando os índices  $j$  por  $k$ , realizando a subtração  $r_{ikj} - r_{ijk} = 0$  e lembrando da independência linear dos vetores  $r_i$  e  $r_3$ , escreve-se:

$$\frac{\partial \Gamma_{ik}^n}{\partial u^j} - \frac{\partial \Gamma_{ij}^n}{\partial u^k} + \Gamma_{ik}^l \Gamma_{lj}^n - \Gamma_{ij}^l \Gamma_{lk}^n = b_{ik} b_j^n - b_{ij} b_k^n \quad (4.55)$$

e;

$$\frac{\partial b_{ik}}{\partial u^j} - \frac{\partial b_{ij}}{\partial u^k} + \Gamma_{ik}^l b_{lj} - \Gamma_{ij}^l b_{lk} = 0 \quad (4.56)$$

Essa última equação é a já conhecida equação de *Codazzi*.

### 4.8.3 Tensor de Riemann e a Curvatura de Gauss

Introduzindo a quantidade:

$$R_{ijk}^n = \frac{\partial \Gamma_{ik}^n}{\partial u^j} - \frac{\partial \Gamma_{ij}^n}{\partial u^k} + \Gamma_{ik}^l \Gamma_{lj}^n - \Gamma_{ij}^l \Gamma_{lk}^n$$

isto é, o conhecido símbolo ou tensor de Riemann. Com essa relação é possível reescrever a equação (4.55) de forma a se obter a relação;

$$R_{ijk}^n = b_{ik} b_j^n - b_{ij} b_k^n : \quad (4.57)$$

Multiplicando essa última relação por  $g_{nm}$ , encontra-se:

$$R_{ijk}^n g_{nm} = b_{ik} g_{nm} b_j^n - b_{ij} g_{nm} b_k^n. \quad (4.58)$$

Dessa forma, sendo  $r_{ijk}^n g_{nm} = r_{mijk}$ , a equação anterior fica:

$$R_{mijk} = b_{ik} b_{mj} - b_{ij} b_{mk} \quad (4.59)$$

Dessa última relação observa-se que  $R_{2121} = b_{11} b_{22} - b_{12} b_{21} = eg - f^2$ . As quantidades  $R_{mijk}$  e  $R_{ijk}^n$  são componentes do tensor curvatura de espaços riemannianos.

A curvatura gaussiana então pode ser escrita como:

$$R_{2121} = r_{121}^n g_{n2} \quad \longrightarrow \quad R_{2121} g^{n2} = r_{121}^n$$

Logo:

$$(eg - f^2) g^{n2} = R_{121}^n \quad \longrightarrow \quad (eg - f^2) g^{n2} = R_{2121} g^{n2}$$

Assim:

$$\frac{1}{EG - F^2} (eg - f^2) = R_{2121} \frac{1}{EG - F^2}$$

Desse modo a curvatura de Gauss em função do símbolo de Riemann pode ser escrita como:

$$K = \frac{R_{2121}}{EG - F^2}$$

O resultado é interessante. A curvatura de Gauss é proporcional ao conhecido tensor de Riemann, para o caso totalmente covariante.

O escalar de Ricci em duas dimensões pode ser escrito:

$$(EG - F^2) R = 2R_{2121}$$

Comparando a curvatura gaussiana,  $K$ , e o escalar de Ricci,  $R$ , encontra-se:

$$K = \frac{R}{2}$$

Esse resultado pode ser comparado com os exemplos já apresentados. Para uma esfera em duas dimensões, a curvatura gaussiana  $K = 1/a^2$  e dessa forma o resultado para o escalar de curvatura será  $R = 2/a^2$ . Isso realmente era o esperado, visto que esse valor foi obtido na Eq. (4.43).

## Capítulo 5

# O Escalar de Curvatura e a Energia Livre de Frank

Em meados da década de 1980, S. Hess e colaboradores apresentaram um trabalho mostrando que propriedades como a elasticidade e a viscosidade, poderiam ser obtidas a partir de uma transformação afim (ponto a ponto) de um potencial esférico, de um líquido isotrópico, para um potencial de interação elipsoidal de um cristal líquido [7]. Anos mais tarde, em meados de 2007, M. Simões e colaboradores, propuseram um método que considera tal deformação do potencial como dependente localmente da posição [8].

Considerando um líquido isotrópico, as interações desse potencial esférico podem ser deformadas de tal forma a se transformar em um potencial elipsoidal.

Assumindo que o potencial elipsoidal,  $\Phi_E$ , pode ser transformado em um potencial de interação esférico,  $\Phi_S$ , [7] a partir de uma transformação afim apropriada, têm-se:

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

em que  $\mathbf{r}$  é um vetor conectando duas partículas submetidas a transformação e os índices  $S$  e  $E$  rotulam as simetrias esféricas e elipsoidais, respectivamente.

A substituição do potencial esférico para o elipsoidal pode ocorrer se a distância entre dois pontos fornecidos pelo comprimento de arco, e conseqüentemente pela métrica, forem equidistantes na superfície equipotencial.

A transformação sugerida acima é independente da posição, entretanto, se for considerado que a amostra nemática não está homogeneamente alinhada, a transformação afim será função da posição e, conseqüentemente, as definições de derivadas devem ser substituídas. Desse modo, considerando que,

$$dr^i = \frac{\partial r^i}{\partial r^j} dr^j \quad e \quad \frac{\partial}{\partial r^i} = \frac{\partial r^i}{\partial r^j} \frac{\partial}{\partial r^i}$$

mostrou-se que a partir da aproximação de transformação afim dependente da posição, a amostra nemática possui uma descrição matemática, via geometria diferencial, na qual existe uma curvatura intrínseca na superfície da amostra nemática.

A partir dessa hipótese, M. Simões e M. Pazetti [9] mostraram que o tensor de deformação de uma amostra nemática está relacionado à curvatura da amostra

segundo:

$$R_{ij} - \frac{1}{2}Rg_{ij} = G\sigma_{ij} \quad (5.2)$$

a qual é similar à equação de Einstein. A diferença entre a Eq.(5.2) e a equação de Einstein está na ausência da parte temporal e na assinatura da parte espacial que é positiva definida,  $\{+, +, +\}$ .

A minimização simultânea dos termos da equação que levam a Eq. (5.2) fornece que a Energia de Frank, Eq. (2.22), é proporcional ao escalar de curvatura [9]:

$$R = GF_d \quad (5.3)$$

A relação anterior permite obter a curvatura da amostra nemática a partir da energia livre ou o inverso. A vantagem é que dada a curvatura, que depende apenas de dois parâmetros livres, pode-se calcular facilmente a energia de Frank, que depende de três parâmetros, ou seja, calcular a curvatura torna-se um método mais econômico.

Nas seções seguintes serão calculadas a métrica e o escalar de Ricci para uma amostra nemática uniaxial. Na sequência, os resultados serão relacionados com a energia livre de Frank.

Da relação entre a curvatura e a energia de deformação, determina-se a relação entre as constantes elásticas e as geométricas, o que permitirá discutir os resultados utilizando dados experimentais.

## 5.1 Amostra Nemática com o Campo Diretor Localmente Variável

Considere uma amostra nemática uniaxial não alinhada com os vetores de base ortogonais, dados por:  $E^l = \{\hat{l}_1, \hat{l}_2, \hat{l}_3\}$ , os quais representam a base do sistema de coordenadas independente da posição fixa do laboratório e  $E^e = \{\hat{e}_1, \hat{e}_2, \hat{e}_3\}$  representando a base ortogonal dependente da posição em cada ponto da amostra, com a condição de que um dos versores sempre coincide com o vetor diretor, por exemplo,  $\hat{e}_1 = \mathbf{n}$ . Deve-se assumir que os versores  $E^e$  são determinados pelos autovalores do operador dependente da posição mapeados do sistema de laboratório para os sistema fixo na amostra.

Escrevendo um vetor arbitrário no sistemas de coordenadas do laboratório:

$$\mathbf{A} = \hat{A}^i \hat{l}_i \quad (5.4)$$

em que  $\hat{A}^i$  são as componentes do vetor  $\mathbf{A}$  nas base  $\hat{l}_i$ . Para um tensor na base  $\hat{e}_1$ , escreve-se:

$$\mathbf{A} = A^i \hat{e}_i \quad (5.5)$$

Como a base é ortonormal, pode-se rescrever a relação anterior utilizando as componentes duais,  $\{\hat{e}^i\}$ , de tal forma que realizando o produto escalar entre a base do vetor, Eq. (5.5) e a base dual;

$$\hat{e}^j \mathbf{A} = A^i \hat{e}_i \hat{e}^j = A^i \delta_i^j$$

pode-se escrever:

$$A^i = \mathbf{A} \hat{e}^i \quad (5.6)$$

Desse modo, substituindo a Eq. (5.4) na Eq. (5.6), obtém-se a seguinte relação:

$$A^i = \left( \hat{e}^i \cdot \hat{l}_j \right) \hat{A}^j$$

no qual fica:

$$A^i = \Lambda_j^i \hat{A}^j \quad (5.7)$$

em que:

$$\Lambda_j^i = \left( \hat{e}^i \cdot \hat{l}_j \right) \quad (5.8)$$

Usando as leis de transformações tensoriais apresentadas no Capítulo 4, Eqs. (4.2) e (4.2), as leis de transformação para os elementos infinitesimais  $d\mathbf{r}$  e  $\partial/\partial\mathbf{r}$ , em que  $\mathbf{r}^i$  e  $\mathbf{r}^j$  são as componentes dos vetores  $\mathbf{r}$  no sistema de coordenadas  $E^e$  e  $E^l$  respectivamente. Assim:

$$dr^i = \frac{\partial r^i}{\partial \hat{r}^j} dr^j \quad e \quad \frac{\partial}{\partial r^i} = \frac{\partial \hat{r}^i}{\partial r^j} \frac{\partial}{\partial \hat{r}^i} \quad (5.9)$$

A partir dessas relações, fazendo:

$$\Lambda_j^i = \frac{\partial r^i}{\partial \hat{r}^j} \quad e \quad \hat{\Lambda}_j^i = \frac{\partial \hat{r}^i}{\partial r^j} \quad (5.10)$$

desse modo,

$$dr^i = \Lambda_j^i dr^j \quad e \quad \frac{\partial}{\partial r^i} = \hat{\Lambda}_j^i \frac{\partial}{\partial \hat{r}^i} \quad (5.11)$$

combinando as definições, Eqs. (5.8) e (5.11), escreve-se:

$$\left( \hat{e}^i \cdot \hat{l}_j \right) \left( \hat{e}^j \cdot \hat{l}_k \right) = \Lambda_j^i \hat{\Lambda}_k^j = \delta_k^i \quad (5.12)$$

A consequência dessa equação é a invariância do produto escalar sobre transformações de coordenadas, ou seja, a norma é preservada. Em particular, a normalização do vetor diretor é conservada sobre transformações de coordenadas, assim:  $n^i n_j = n^j n_i = 1$ .

Considerando agora uma forma explícita para os operadores que mapeiam as componentes vetoriais de um sistema ortogonal para outro. No início da seção, foi dito que os versores eram determinados pelos autovalores desses operadores. Como os operadores são  $\Lambda_j^i$  e  $\acute{\Lambda}_j^i$ , considera-se a transformação de um vetor no sistema de coordenadas  $E^l$  para  $E^e$ . Diagonalizando  $\Lambda_j^i$ , têm-se:

$$\begin{aligned}\Lambda_j^i n^j &= \lambda^{(n)} n^i \\ \Lambda_j^i m^j &= \lambda^{(m)} m^i \\ \Lambda_j^i p^j &= \lambda^{(p)} p^i\end{aligned}\tag{5.13}$$

Como o operador  $\Lambda_j^i$  é simétrico, os três valores ortonormais são identificados com;  $\{\hat{e}_1, \hat{e}_2, \hat{e}_3\} \equiv \{\mathbf{n}, \mathbf{m}, \mathbf{p}\}$ . Uma propriedade importante dos autovalores é que eles formam uma base completa, consequentemente:

$$n^i n_j + m^i m_j + p^i p_j = \delta_j^i\tag{5.14}$$

e diretamente:

$$\Lambda_j^i = \lambda^{(n)} n^i n_j + \lambda^{(m)} m^i m_j + \lambda^{(p)} p^i p_j\tag{5.15}$$

o mesmo procedimento fornece para a operação inversa:

$$\acute{\Lambda}_j^i = \frac{1}{\lambda^{(n)}} n^i n_j + \frac{1}{\lambda^{(m)}} m^i m_j + \frac{1}{\lambda^{(p)}} p^i p_j\tag{5.16}$$

A partir da forma explícita para os operadores que atuam nas componentes dos vetores dos sistemas ortogonais, é possível determinar uma métrica e sua transformada.

## 5.2 Métrica

A distância entre dois pontos para uma superfície plana, como não existe diferença entre vetores covariantes e contravariantes, pode ser escrita como:

$$dl^2 = \delta_{ij} dr^i dr^j\tag{5.17}$$

no plano, pode-se definir que a métrica,  $g_{ij}$  coincide com  $\delta_{ij}$

$$dl^2 = g_{ij} dr^i dr^j \quad (5.18)$$

Como visto no Capítulo anterior, a métrica é um tensor e transforma-se de acordo com a Eq. (4.27). Desse modo, usando a relação para a transformação de coordenadas e utilizando os operadores determinados explicitamente, Eqs.(5.15) e (5.16), escreve-se:

$$\begin{aligned} g_{kl} &= \delta_{ij} \hat{\Lambda}_k^i \hat{\Lambda}_l^j \\ &= \delta_{ij} \left( \frac{1}{\lambda^n} n^i n_j + \frac{1}{\lambda^m} m^i m_k + \frac{1}{\lambda^p} p^i p_k \right) \left( \frac{1}{\lambda^n} n^i n_l + \frac{1}{\lambda^m} m^i m_l + \frac{1}{\lambda^p} p^i p_l \right) \\ &= \left( \frac{1}{\lambda^n} \right)^2 n_k n_l + \left( \frac{1}{\lambda^m} \right)^2 m_k m_l + \left( \frac{1}{\lambda^p} \right)^2 p_k p_l \end{aligned} \quad (5.19)$$

Como a amostra é nemática uniaxial, impõem-se propriedades de anisotropia e faz-se a direção anisotrópica coincidir com o diretor, logo:

$$\left( \frac{1}{\lambda^m} \right)^2 = \left( \frac{1}{\lambda^p} \right)^2 \quad (5.20)$$

a métrica fica:

$$g_{kl} = \left( \frac{1}{\lambda^n} \right)^2 n_k n_l + \left( \frac{1}{\lambda^m} \right)^2 (m_k m_l + p_k p_l) \quad (5.21)$$

usando relação de completeza, Eq.(5.14), na equação acima;

$$\begin{aligned} g_{kl} &= \left( \frac{1}{\lambda^n} \right)^2 n_k n_l + \left( \frac{1}{\lambda^m} \right)^2 (m_k m_l + p_k p_l) \\ &= \left( \frac{1}{\lambda^n} \right)^2 n_k n_l + \left( \frac{1}{\lambda^m} \right)^2 (\delta_{kl} - n_k n_l) \\ &= \left( \frac{1}{\lambda^m} \right)^2 \delta_{kl} + \left( \left( \frac{1}{\lambda^n} \right)^2 - \left( \frac{1}{\lambda^m} \right)^2 \right) n_k n_l \end{aligned} \quad (5.22)$$

Renomeando os termos;

$$g_0 = \left( \frac{1}{\lambda^n} \right)^2$$

e

$$g_1 = \left( \left( \frac{1}{\lambda^n} \right)^2 - \left( \frac{1}{\lambda^m} \right)^2 \right)$$

escrevesse a métrica como:

$$g_{ij} = g_0 \delta_{ij} + g_1 n_i n_j \quad (5.23)$$

e conseqüentemente a inversa será dada por:

$$g^{ij} = G_0 \delta^{ij} + G_1 n^i n^j \quad (5.24)$$

Para calcular a relação entre as constantes, pode-se recorrer a relação entre o produto da matriz da métrica pela sua inversa,  $g_{ij} g^{jk} = \delta_i^k$ , de tal forma que:

$$\begin{aligned} g_{ij} g^{jk} = \delta_i^k &= (g_0 \delta_{ij} + g_1 n_i n_j) (G_0 \delta^{jk} + G_1 n^j n^k) \\ &= G_0 g_0 \delta_i^k + G_0 g_1 \delta^{jk} n_i n_j + G_1 g_0 n^j n^k \delta_{ij} + G_1 g_1 n^j n^k n_i n_j \\ &= G_0 g_0 \delta_i^k + (G_0 g_1 + G_1 g_0 + G_1 g_1) n^i n_j \end{aligned} \quad (5.25)$$

a relação será verdadeira, ou seja, igual a unidade, somente se:

$$G_0 = \frac{1}{g_0} \quad (5.26)$$

e

$$G_1 = \frac{g_1}{g_0 (g_0 + g_1)} \quad (5.27)$$

As Eqs. (5.23) e (5.24) podem ser escritas apenas em função da constante  $g_1$ . Desse modo<sup>a</sup>:

$$g_{ij} = (1 - g_1) \delta_{ij} + g_1 n_i n_j \quad (5.28)$$

e a inversa:

$$g^{ij} = \frac{1}{(1 - g_1)} \delta^{ij} + g_1 n^i n^j \quad (5.29)$$

### 5.3 Conexão e o Tensor Curvatura

Nessa seção será calculado, a partir da métrica e sua inversa, Eq.(5.23) e Eq.(5.24), a conexão, e posteriormente, o tensor curvatura.

A conexão, Eq.(4.28), depende das derivadas primeiras da métrica, desse modo, renomeando as constantes  $g_0, g_1, G_0$  e  $G_1$  para  $a, b, c$  e  $d$ , respectivamente, calcula-se:

---

<sup>a</sup>Essa demonstração pode ser feita realizando-se um produto entre a métrica e o diretor  $g_{ij} n^j$ , de tal forma que encontra-se a relação entre  $g_0$  e  $g_1$ .

$$\begin{aligned}
\partial_k g_{jl} &= b(n_l \partial_k n_j + n_l \partial_k n_l) \\
\partial_j g_{kl} &= b(n_l \partial_j n_k + n_k \partial_j n_l) \\
\partial_l g_{jk} &= b(n_k \partial_l n_j + n_j \partial_l n_k)
\end{aligned}$$

As equações anteriores podem ser simplificadas considerando um operador dado por:

$$\mathbb{C}_{ijk}^{abc} = \delta_i^a \delta_j^b \delta_k^c + \delta_k^a \delta_j^b \delta_i^c \quad (5.30)$$

ou ainda:

$$\mathbb{C}_{ijk}^{abc} = \mathbb{S}_{ik}^{ac} \delta_k^b = (\delta_i^a \delta_k^c + \delta_k^a \delta_i^c) \delta_j^b \quad (5.31)$$

Essa notação simplificada é útil, pois, a conexão, que depende da soma das derivadas, pode ser escrita como:

$$\Gamma_{jk}^i = \frac{1}{2} g^{il} b (\mathbb{O}_{jkl}^{abc} + \mathbb{O}_{kjl}^{abc} - \mathbb{O}_{klj}^{abc}) n_a \partial_b n_c \quad (5.32)$$

O tensor de Riemann, Eq.(4.38), depende das derivadas da conexão, consequentemente das derivadas segundas da métrica. Desse modo, torna-se conveniente um procedimento similar ao realizado para calcular as derivadas primeiras. Assim,

$$\begin{aligned}
\partial_k \Gamma_{jl}^i &= \frac{1}{2} b \partial_k (g^{il} (\mathbb{O}_{jkl}^{abc} + \mathbb{O}_{kjl}^{abc} - \mathbb{O}_{klj}^{abc}) n_a \partial_b n_c) \\
&= \frac{1}{2} b ((\partial_k g^{im}) \mathbb{O}_{kjm}^{bac} n_a \partial_b n_c + g^{im} \mathbb{O}_{kjm}^{bac} \partial_k (n_a \partial_b n_c)) \\
&= \frac{bd}{2} \left( \mathbb{O}_{kjm}^{bac} \mathbb{S}_{de}^{il} \delta_k^f n_a \partial_b n_c + g^{im} \mathbb{O}_{kjm}^{bac} \{ \partial_k n_a \partial_b n_c + n_a \partial_k (\partial_b n_c) \} \right)
\end{aligned}$$

o mesmo procedimento pode ser realizado para a derivada da conexão em  $l$ , ou seja,  $\partial_l \Gamma_{jk}^i$ .

Antes de realizar as substituições dos cálculos para as derivadas da conexão, pode-se fazer a seguinte simplificação:

$$R_{jkl}^i = \mathbb{A}_{lk}^{ac} (\partial_a \Gamma_{jc}^i + \Gamma_{ja}^\nu \Gamma_{c\nu}^i) \quad (5.33)$$

no qual o operador  $\mathbb{A}$  é construído como:

$$\mathbb{A}_{lk}^{ac} = \delta_l^a \delta_k^c - \delta_k^a \delta_l^c \quad (5.34)$$

Para encontrar o tensor curvatura substitui-se as derivadas na Eq.(5.33) e realiza-se a expansão da expressão resultante. O cálculo é direto, entretanto, longo. Desse modo, como não há necessidade de realizar essa expansão explicitamente, considera-se

apenas o resultado dado por:

$$R_{jkl}^i = \mathbb{A}_{lk}^{ac} \mathbb{O}_{cjm}^{def} \left\{ \frac{1}{2} \partial_a (g^{im} n_e \partial_d n_f) + \frac{1}{4} g^{\mu m} g^{ip} \mathbb{O}_{\mu ao}^{stu} n_e n_t \partial_d (n_f) \partial_s (n_u) \right\} \quad (5.35)$$

A partir do tensor curvatura podemos agora determinar o escalar de curvatura, a partir da contração da relação anterior.

## 5.4 O Escalar de Curvatura

O escalar de Ricci é definido pela equação, Eq.(4.42). Assim;

$$R = g^{jl} R_{jil}^i = g^{jl} \mathbb{A}_{li}^{ac} \mathbb{O}_{cjm}^{def} \left\{ \frac{1}{2} \partial_a (g^{im} n_e \partial_d n_f) + \frac{1}{4} g^{\mu m} g^{ip} \mathbb{O}_{\mu ao}^{stu} n_e n_t \partial_d (n_f) \partial_s (n_u) \right\} \quad (5.36)$$

Separando a expressão anterior em duas partes, de tal forma que facilite os cálculos, a seguir, que procura-se simplificar o escalar de Ricci. Assim:

$$R_1 = g^{jl} \mathbb{A}_{li}^{ac} \mathbb{O}_{cjm}^{def} \left[ \frac{1}{2} \partial_a (g^{im} n_e \partial_d n_f) \right] \quad (5.37)$$

e:

$$R_2 = \frac{1}{4} g^{\mu m} g^{ip} \mathbb{O}_{\mu ao}^{stu} n_e n_t \partial_d (n_f) \partial_s (n_u) \quad (5.38)$$

Considerando inicialmente a parte do escalar de Ricci,  $R_1$ , utilizando das relações, Eq. (5.30), Eq. (5.31) e Eq. (5.34), e definindo o seguinte operador:

$$\mathbb{T}_{im}^{def} = g^{pq} \mathbb{A}_{qi}^a \mathbb{O}_{pm}^{def} \quad (5.39)$$

Substituindo essa relação na Eq. (5.37), e realizando os cálculos, que são diretos, entretanto extensos, chega-se à:

$$R_1 = -\frac{\partial}{\partial x^a} \left[ \frac{\partial}{\partial x^k} (n_k) n^a \right] - \frac{\partial}{\partial x^a} \left[ n^i g^{ka} \frac{\partial}{\partial x^i} (n_k) \right] + \frac{\partial}{\partial x^k} (g^{ij}) n_j \frac{\partial}{\partial x^i} (n_k) + n^a \frac{\partial}{\partial x^a} (g^{ik}) \frac{\partial}{\partial x^i} (n_k)$$

Essa expressão pode ainda, após algumas manipulações, ser escrita como:

$$R_1 = B (\nabla \mathbf{n} - W)^2 + B \rho [\mathbf{n} \times (\nabla \times \mathbf{n})]^2 + \frac{\partial}{\partial x^a} \left[ n_j \frac{\partial}{\partial n_k} n^a \right] + \frac{\partial}{\partial x^a} \left[ n^i g^{ik} \frac{\partial}{\partial x^i} (n_k) \right] \quad (5.40)$$

Realizando o mesmo procedimento para  $R_2$  escreve-se:

$$R_2 = \frac{1}{2}(-1 + B) [\mathbf{n} \cdot (\nabla \times \mathbf{n})]^2 + \frac{1}{2} [\mathbf{n} \times (\nabla \times \mathbf{n})]^2 (-1 + B + \rho - B\rho) \quad (5.41)$$

em que  $\rho$  é uma contante<sup>b</sup> e  $W$  é um termo de fronteira<sup>c</sup>.

Como os cálculos foram realizados para os termos individualmente, é necessário agora recombina-los. Desse modo, como  $R = R_1 + R_2$ , o escalar de curvatura é dado por:

$$R = B(\nabla \cdot \mathbf{n})^2 + \frac{1}{2}(1 - B) [\mathbf{n} \cdot (\nabla \times \mathbf{n})]^2 + \frac{B(1 + B)}{2 - 2B} [\mathbf{n} \times (\nabla \times \mathbf{n})]^2 - BW - \frac{\partial}{\partial x^a} \left[ n_j \frac{\partial}{\partial n_k} n^a \right] + \frac{\partial}{\partial x^a} \left[ n^i g^{ik} \frac{\partial}{\partial x^i} [n_k] \right] \quad (5.42)$$

Dessa forma, o escalar de curvatura para um cristal líquido nemático fica em função de divergentes e rotacionais. Logo, de maneira direta, percebe-se que a curvatura fica em função dos termos de *splay*, *twist* e *bend*.

## 5.5 As Constantes Elásticas a Partir do Escalar de Curvatura

A equação para curvatura, obtida na Seção 5.4, Eq. (2.22), apresentou-se uma relação em termos das deformações que ocorrem nos cristais líquidos. Desse modo, para facilitar a comparação matemática entre o escalar de curvatura e a Energia livre de Frank, reescreve-se ambas a seguir;

$$F_d = \frac{1}{2}K_{11} (\nabla \cdot \mathbf{n})^2 + \frac{1}{2}K_{22} [\mathbf{n} \cdot (\nabla \times \mathbf{n})]^2 + \frac{1}{2}K_{33} [\mathbf{n} \times (\nabla \times \mathbf{n})]^2 \quad (5.43)$$

e a curvatura:

$$R = B(\nabla \cdot \mathbf{n})^2 + \frac{1}{2}(1 - B) [\mathbf{n} \cdot (\nabla \times \mathbf{n})]^2 + \frac{B(1 + B)}{2 - 2B} [\mathbf{n} \times (\nabla \times \mathbf{n})]^2 - BW - \frac{\partial}{\partial x^a} \left[ n_j \frac{\partial}{\partial n_k} n^a \right] + \frac{\partial}{\partial x^a} \left[ n^i g^{ik} \frac{\partial}{\partial x^i} [n_k] \right]$$

Um ponto importante a ser considerado diz respeito aos dois últimos

<sup>b</sup>O seguinte termo é substituído durante os cálculos:  $n^i n_j \partial_i n_k \partial_j n^k = \rho [\mathbf{n} \times (\nabla \times \mathbf{n})]^2$ .

<sup>c</sup>O termo de fronteira é dado por:  $W = \nabla \mathbf{n}^2 - \partial^i n^j \partial_j n^i$ .

termos da equação acima. As derivadas que aparecem, os dois últimos termos do lado direito, assim como o termo  $(-BW)$ , são relacionadas a termos de superfície e podem ser desprezados, ou seja, a presente análise despreza os termos que envolvem a interação da amostra, restringindo-se aos termos de *bulk*. A relação anterior também mostra apenas uma dependência com a posição, desse modo reescreve-se a equação como:

$$R = B(\nabla \mathbf{n})^2 + \frac{1}{2}(1-B)[\mathbf{n} \cdot (\nabla \times \mathbf{n})]^2 + \frac{B(1+B)}{2-2B}[\mathbf{n} \times (\nabla \times \mathbf{n})]^2 \quad (5.44)$$

O primeiro resultado que segue da Eq. (5.44) é que a aproximação para a curvatura intrínseca do cristal líquido nemático uniaxial depende de três parâmetros que são proporcionais as constantes elásticas. Como  $K_{11}$ ,  $K_{22}$  e  $K_{33}$  são as constantes elásticas e assumindo que a curvatura deve ser proporcional a energia livre de Frank, Eq.(5.3), isso implica que as constantes elásticas serão proporcionais as constantes geométricas<sup>d</sup>,  $B$ , pelo fator  $G$ . Assim, das Eqs. (5.3), (5.43) e (5.44), as constantes elásticas são dadas por:

$$K_{11} = \frac{2B}{G} \quad , \quad K_{22} = G(1-B) \quad e \quad K_{33} = \frac{B(1+B)}{G(1-B)} \quad (5.45)$$

As equações acima dependem de dois parâmetros a se determinar,  $G$  e  $B_1$ , contudo, são duas incógnitas e três equações o que permite determinar ambas as constantes. Considerando as seguintes razões:

$$r_{21} = \frac{K_{22}}{K_{11}} \quad e \quad r_{31} = \frac{K_{33}}{K_{11}}$$

determina-se as constantes geométricas e o procedimento leva à seguinte relação:

$$\frac{2K_{22}K_{11}K_{33} - K_{22}^2(K_{33} - K_{11})}{K_{22}^3} = 1$$

Rotulando a relação acima por  $E_r$ , escreve-se:

$$E_r = \frac{2K_{22}K_{11}K_{33} - K_{22}^2(K_{33} - K_{11})}{K_{22}^3} \quad (5.46)$$

O primeiro resultado encontrado é uma relação constante entre  $K_{11}$ ,  $K_{22}$  e  $K_{33}$  dado pela Eq. (5.46). Desse modo, os valores das constantes elásticas para um nemático poderão variar, entretanto, o valor para  $E_r$  será igual a 1. Como é conhecido que  $K_{33}$  tem valor maior que as outras duas constantes elásticas, a equação para  $E_r$  é escrita de tal forma que os valores para as três constantes ficam do lado direito da equação, sendo próximo de 1 ou exatamente 1 dependendo do ajuste.

<sup>d</sup>A constante  $B$  pode ser associada a constante  $g_1$  da parte antissimétrica da métrica.

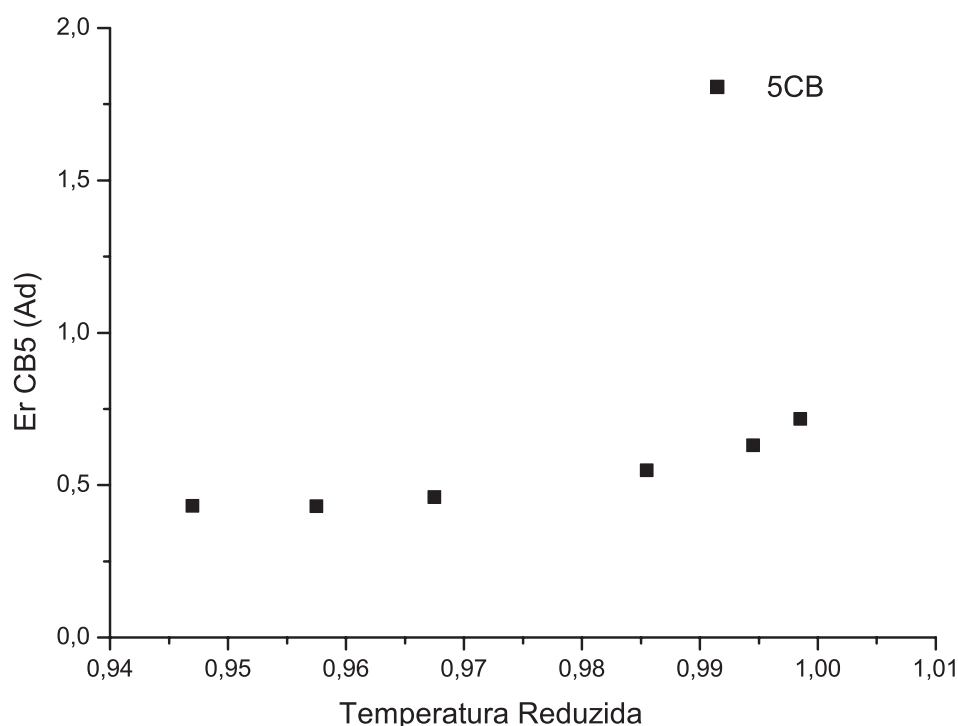
Para testar o resultado teórico e verificar o ajuste, pode-se recorrer a dados experimentais. Assim, primeiramente serão considerados os valores experimentais retirados do texto produzido por H. Hakemi e colaboradores [33].

O experimento determinou os valores das constantes elásticas da série homóloga  $n-CB$ . Desse modo, podemos utilizar os seguintes dados, registrados na tabela (5.1) para o  $5CB$  em função da temperatura reduzida para construirmos um registro gráfico.

**Tabela 5.1** – Constantes elásticas em função da temperatura, temperatura reduzida e valores para as razões entre as constantes elásticas para o composto  $5CB$

$K_{11}$	$K_{22}$	$K_{33}$	Temperatura Reduzida	$r_{21} (K_{22}/K_{11})$	$r_{31} (K_{33}/K_{11})$
0,91	0,48	1,08	0,9985	0,52747	1,18681
1,25	0,6	1,51	0,9945	0,48	1,208
1,67	0,72	2,05	0,9855	0,43114	1,22754
2,34	0,88	2,93	0,9675	0,37607	1,25214
2,84	0,99	3,55	0,9575	0,34859	1,25
3,2	1,12	4	0,947	0,35	1,25

O comportamento da relação  $E_r$  fica:



**Figura 5.1** – Distribuição dos dados experimentais registrados na Tabela 5.1, representando a concordância entre a relação  $E_r$  medidas em função da temperatura reduzida, definida pelos autores do texto citado, para o composto  $5CB$ , no qual o ponto 1 é a temperatura de transição de fase nemática isotrópica.

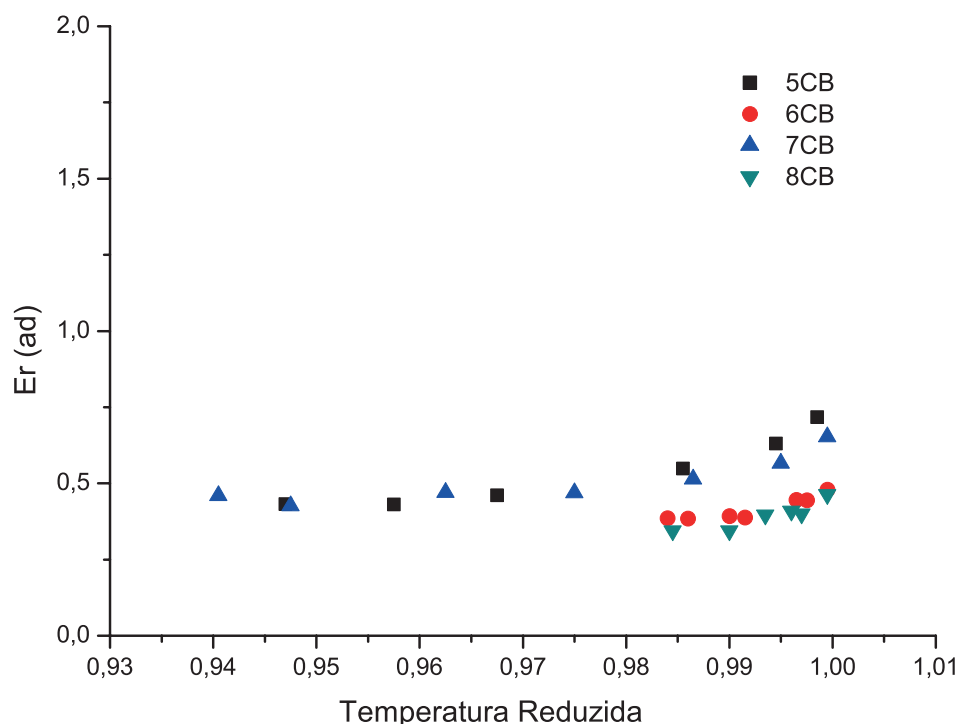
A temperatura reduzida apresentada na Tabela 5.1 e utilizada na construção do registro gráfico é dada pela relação,

$$T_r = T/T_{ni} ,$$

e  $T$  é a temperatura da na escala Celsius e  $T_{ni}$  é a temperatura da transição de fase nemática isotrópica.

Observa-se que a relação é praticamente constante durante quase toda a fase nemática, entretanto, o valor é mais próximo de  $1/2$  e quando a temperatura se aproxima da transição de fase, o comportamento das constantes elásticas tendem rapidamente a 1.

Utilizando os dados para os demais cristais líquidos da série homóloga  $n-CB$ , ver apêndice A, pode-se obter o registro representado pelo gráfico, Figura (5.2). O ajuste da Eq. (5.46) em função da temperatura permite a comparação do comportamento entre os compostos da série.



**Figura 5.2** – Distribuição dos dados experimentais registrados no Apêndice C, representando a concordância entre a relação  $E_r$  medidas em função da temperatura, para a série homóloga  $n - CB$ , no qual o ponto 1 é a temperatura de transição de fase nemática isotrópica e o ponto 0 é a transição nemático-cristalino.

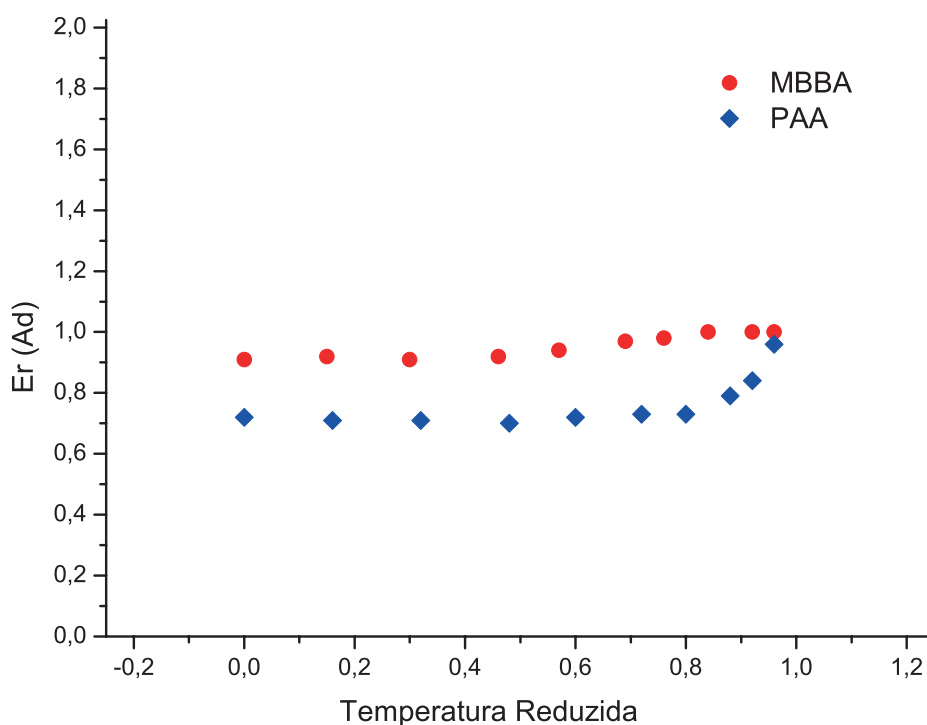
Novamente se observa que comportamento é similar para todos os compostos. A tendência constante na maior parte da fase nemática e a mudança rápida quando a temperatura se aproxima da transição de fase  $NI$ .

Um outro conjunto de dados pode ser utilizado para se avaliar o comportamento sugerido pela relação funcional entre as constantes elásticas, Eq.(5.46). Esses são apresentados na tabela 5.2.

**Tabela 5.2** – Temperaturas reduzidas e a relação entre as constantes elásticas dos compostos MBBA e PAA

MBBA			PAA		
T(°C)	Tr	Er	T(°C)	Tr	Er
19	0	0,91	110	0	0,72
23	0,15	0,92	114	0,16	0,71
27	0,30	0,91	118	0,32	0,71
31	0,46	0,92	122	0,48	0,70
34	0,57	0,94	125	0,60	0,72
37	0,69	0,97	128	0,72	0,73
39	0,76	0,98	130	0,80	0,73
41	0,84	1,00	132	0,88	0,79
43	0,92	1,00	133	0,92	0,84
44	0,96	1,00	134	0,96	0,96

Os dados levam ao gráfico:



**Figura 5.3** – Distribuição dos dados experimentais para os compostos MBBA e PAA representando a concordância entre a relação  $E_r$  medidas em função da temperatura, na qual é utilizada a temperatura nemática.

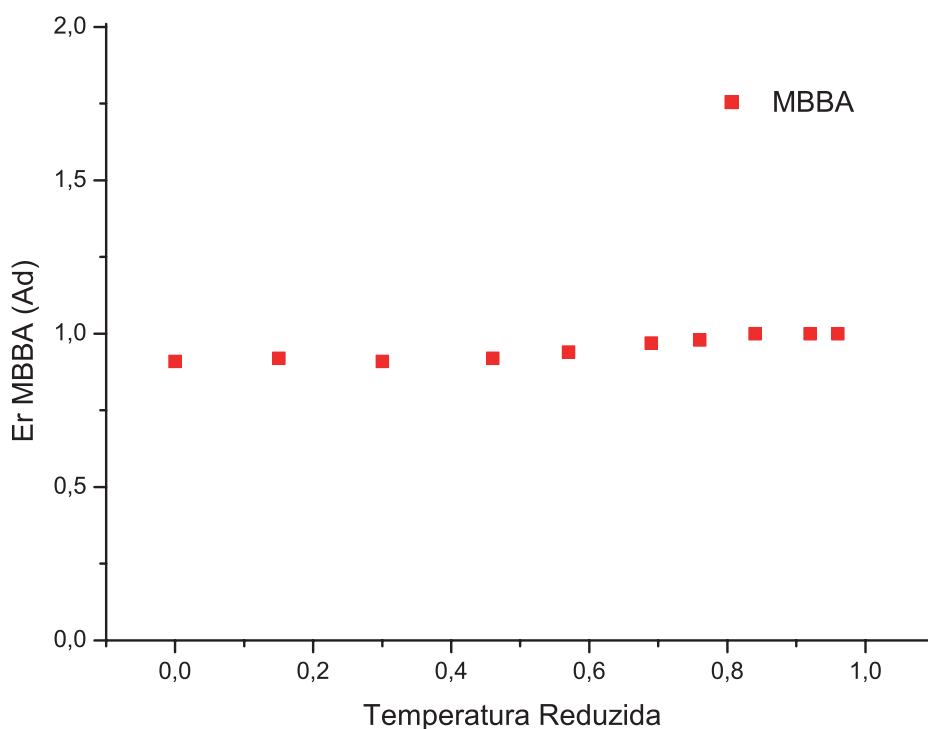
Os dados anteriores dos compostos *MBBA* e o *PAA* foram calculados a partir de [34][35], e com base nos dados experimentais, novamente um registro gráfico é utilizado para se analisar a relação funcional obtida em função da temperatura reduzida. A temperatura nemática utilizada para a construção da representação acima é dada por:

$$t_N = \frac{T - T^*}{T_{NI} - T^*} ,$$

em que  $T^*$  é a representação para a temperatura da transição de fase nemática a baixa temperatura.[36–38]

Novamente o mesmo comportamento para a relação entre as constantes elásticas em função da temperatura é verificado. Entretanto, para o composto MBBA a relação funcional fica muito próximo da constante teórica durante toda a fase nemática e de uma maneira muito mais regular que os demais compostos. Desse modo, pode ser conveniente destacar o comportamento para o MBBA.

Observa-se que mesmo com o aumento da temperatura a relação entre as constantes elásticas praticamente não é alterada, Figura (5.4), permanecendo próximo a 1, com um desvio de no máximo 9 %. Vale observar que esse desvio não é calculado aplicando-se teoria de erros e sim uma estimativa, de certa maneira grosseira, a partir dos dados registrados na Tabela 5.2.



**Figura 5.4** – Distribuição dos dados experimentais para o composto MBBA representando a concordância entre a relação  $E_r$  medidas em função da temperatura reduzida.

Para todos os outros compostos, próximos a temperatura de transição de fase nemática isotrópica, os valores convergem bruscamente de um valor menor do que a unidade para o valor máximo e constante 1. Para o MBBA não se verifica essa mudança repentina e sim um comportamento homogêneo durante toda a fase, a partir da transição nemático-cristalino à nemático-isotrópico.

Para todos os dados experimentais dos vários compostos, Apêndice A, observa-se que apesar de não existir uma concordância com os valores experimentais e o teórico para  $E_r$ , o comportamento durante quase toda a fase nemática ainda sim é constante. É importante ressaltar que nada é dito sobre a análise de erros dos dados utilizados

e também não são possíveis de serem obtidos a partir das referências. Desse modo, se observarmos o MBBA, temos um excelente ajuste dos dados experimentais com a relação teórica e para os demais compostos, a menos de variações nos valores, o comportamento praticamente constante também é observado.

# Considerações Finais e Conclusões

Nesse trabalho mostrou-se que a partir da relação entre a energia livre de Frank e o escalar de Curvatura, Eq. (5.3), é possível determinar, para um cristal líquido nemático uniaxial, as constantes elásticas a partir de parâmetros puramente geométricos. Para a física de cristais líquidos, esse resultado é de grande importância, afinal, as constantes elásticas podem ser calculadas sem a necessidade de informações e nenhuma assunção adicional a respeito das interações moleculares da amostra. Além disso, a hipótese, Eq. (5.3) nos levou à relação, Eq. (5.46), que nos diz que as constantes elásticas obedecem a uma relação obtida a partir de uma equação similar a de Einstein para gravitação.

A partir da Eq. (5.46) foi possível comparar o resultado teórico utilizando dados dos valores das constantes elásticas em função da temperatura para os compostos da série *nCB* e os compostos *PAA* e *MBBA*, Seção 5.5 e Apêndice A. O registro gráfico mostrou que as três constantes elásticas, relacionadas às deformações de *bend*, *twist* e *play*, se relacionam através da Eq. (5.46), com um comportamento que se mantém constante por quase toda a fase nemática, entretanto, o valor esperado teoricamente difere do valor calculado a partir dos dados experimentais, exceto, para o *MBBA*, o qual possui os valores muito próximos a predição teórica por quase toda a fase e durante 30 % da fase é idêntico aos valores previstos.

As moléculas da amostra do cristal líquido possuem uma simetria termodinâmica elipsoidal e essas características são transmitidas à amostra. Todavia, ao se analisar as curvas para os compostos, observa-se que próximo à transição nemática-isotrópica, o comportamento da curva aproxima-se do esperado, entretanto, em temperaturas mais baixas, próximas da transição nemática-cristalina, o modelo não se ajusta adequadamente aos dados experimentais, ou seja, exceto para o *MBBA*, que corrobora a previsão teórica, os outros compostos possuem um valor constante, entretanto mais baixo, sugerindo alguma divergência entre o modelo e os dados experimentais, que pode estar relacionada ao modelo utilizado.

A geometria de um cristal líquido é altamente anisotrópica em uma direção, com uma simetria elipsoidal. As análises realizadas não permitem suposições a respeito da relação entre a mudança de comportamento e a geometria molecular e as interações entre as moléculas. É possível afirmar que existe uma diferença entre o valor esperado e o experimental para a maioria dos compostos analisados, mesmo sem as informações a respeito da acurácia dos dados experimentais.

Apesar de existir diferenças observadas a partir das Figuras 5.1, 5.2 e 5.4, o modelo responde adequadamente quando fornece uma relação entre as constantes elásticas e as constantes geométricas, oriundas da métrica da amostra, sem informações a

respeito da interação molecular.

Obviamente ficam as perguntas: Qual o motivo da diferença para o valor da relação obtida teoricamente e o valor quando calculada a partir de dados experimentais? Existe algum parâmetro que foi desconsiderado em nossa análise e levou a essa diferença? O desconhecimento da análise de incertezas, para os dados experimentais, pode justificar essa diferença?

Todas as perguntas são pertinentes, entretanto, seria necessário rever o modelo e as hipóteses. Da revisão do modelo, as perguntas feitas acima poderão ser respondidas.

Uma última observação é em relação aos termos de superfície, ou seja, se a interação entre a amostra e as paredes do recipiente que a contém for considerada, os resultados seriam diferentes? As constantes elásticas, podem possuir valores ligeiramente maiores ou menores, devido ao método de medida, visto que para obter valores de deformação geralmente se aplica uma tensão sobre o material, com respostas diferentes, de tal forma que os valores poderiam ser ligeiramente diferentes dos valores obtidos na literatura que foram utilizados. Somando essas possibilidades a uma alteração no modelo sugerido neste trabalho, um refinamento teórico pode ser feito, entretanto, não houve tempo hábil para ser apresentado nesse trabalho.

Após todas essas análises, pode-se dizer que alcançamos o objetivo, obter as constantes elásticas a partir do escalar de curvatura, ou seja, a partir de parâmetros puramente geométricos.

# Referências

- [1] W. H. Zurek, *Nature* **317**, 505 (1985).
- [2] I. Chuang, R. Durrer, N. Turok, B. Yurk, *Science* **251**, 4999, 1336 (1991).
- [3] T. W. B. Kibble, *Physics Today* **september**, **47** (2007).
- [4] R. Ray, A. M. Srivastava, *Physical Review D* **69**, 103525 (2004).
- [5] R. Monaco, J. Mygind, M. Aaroe, R. J. Rivers, V. P. Kosholets, *PRL* **96**, 180604 (2006).
- [6] T. W. B. Kibble, *Physica C* **369**, 87 (2002);
- [7] D. Baalss, S. Hess, *Phys. Rev. Lett.* **57**, 86 (1986).
- [8] M. Simões, A. Campos, D. Barbato, *Phys. Rev. E* **75**, 061710 (2007).
- [9] M. Simões, M. Pazetti, *EPL* **92**, 14001 (2010).
- [10] T. W. B. Kibble, *Phil. Trans. R. Soc.* **366**, 2793 (2008);
- [11] S. Singh, *Liquid Crystals - Fundamentals*, New Jersey, World Scientific Publishing, London, Singapore, Hong Kong (2002).
- [12] P. G. de Gennes, J. Prost, *The Physics of Liquid Crystals*, 2<sup>a</sup> Ed., Oxford, Clarendon Press, Oxford, (1993).
- [13] S. Chandrasekhar, *Liquid Crystals*, 2<sup>a</sup> Ed., New York, Cambridge University Press, 1992).
- [14] Disponível em: [http://en.wikipedia.org/wiki/Blue\\_Phase\\_Mode\\_LCD](http://en.wikipedia.org/wiki/Blue_Phase_Mode_LCD). Acessado em 11 junho de 2014.
- [15] C. Kittel, *Introduction to Solid State Physics*. 7<sup>a</sup> Ed., New York, John Wiley & Sons, Inc., (1996).
- [16] A. M. N. Figueiredo, S. R. A. Salinas, *The Physics of Lyotropic Liquid Crystals*, New York, Oxford University Press, (2005).
- [17] P. Oswald, P. Peranski, *Nematic and Cholesteric Liquid Crystals*, London, Taylor & Francis Group, (2005).
- [18] W. H. de Jeu, *Physical Properties of Liquid Crystalline Materials*, New York, Gordon And Breach, Science Publishers Inc. (1980).

- [19] D. S. Simeão, *Universalidade e Criticalidade da Mesofase Nemática*, 2013. 107 f. Tese (Doutorado em Física) - Universidade Estadual de Londrina. Londrina, (2013).
- [20] G. F. Simmons, *Cálculo com Geometria Analítica, Vol. 2*, São Paulo, Makron Books, (1988).
- [21] G. B. Thomas, *Cálculo*, Vol. 2, 10 Ed., São Paulo, Pearson-Addison Wesley, (2003).
- [22] D. J. Struik, *Lectures on Classical Differential Geometry*, Cambridge, Addison - Wesley Press INC., (1950).
- [23] J. J. Stoker, *Differential Geometry*, New York, John Wiley & Sons Inc., (1969).
- [24] B. A. Dubrovin, A. T. Fomenko, S. P. Novikov, *Graduate Texts in Mathematics*, New York, Springer-Verlag, (1984).
- [25] M. Spivak, *A Comprehensive Introduction to Differential Geometry, Vol. 2*, 3<sup>a</sup> Ed., Houston, Texas, Publish or Perish INC., (1999).
- [26] R. A. D’Inverno, *Introducing Einstein’s Relativity*, Oxford, Oxford University Press. (1998).
- [27] G. Lugo, *Defferential Geometry in Physics - Lectures Notes*, Departament of Mathematical Science, University of North Carolina at Wilmington (1995 - 1998).
- [28] S. Weinberg, *Gravitation and Cosmology: Principles and Applications of the General Theory of Relativity*, John Wiley and Sons. (1972).
- [29] E. Butkov, *Física Matemática*, Rio de Janeiro: LTC S.A. (1988).
- [30] G. B. Arfken, H. J. Weber, *Física Matemática, Métodos Matemáticos para Engenharia e Física*, Rio de Janeiro: Campus/Elsevier (2007).
- [31] L. Landau, E. Lifchitz, *Theory of Elasticity*, 3<sup>a</sup> Ed., Heinenmann, (1986).
- [32] R. A. Mould, *Basic Relativity*, 2<sup>a</sup> Ed., New York, Springer-Verlag New York INC. (2001).
- [33] H. Hakemi, E. F. Jagodzinski, D. B. DuPré, *The Journal of Chemical Physics* **78**, 1513 (1983);
- [34] W. H. de Jeu, W. A. P. Claassen and M. J. Spruijt, *Mol. Cryst. Liq. Cryst.* **37**, 269 (1976).
- [35] G. P. Chen, H. Takezoe, and A. Fukuda, *Liq. Cryst.* **5**, 341 (1989).
- [36] M. Simões, S. M. Domiciano, *Mol. Cryst. Liq.* **367**, 1 (2001).

[37] M. Simões, S. M. Domiciano, Phys. Rev. E **66**, 061703 (2002).

[38] M. Simões, S. M. Domiciano, Phys. Rev. E **68**, 011705 (2003).

# Apêndices

# Apêndice A

## Dados Experimentais: Compostos 6CB, 7CB e 8CB

Nesse apêndice são apresentados os dados experimentais para as constantes elásticas  $K_{11}$ ,  $K_{22}$  e  $K_{33}$ , para os demais compostos da série homóloga  $n - CB$ .

A partir do registro dos dados experimentais em tabelas, são apresentados os registros gráficos individuais, de forma que uma análise do comportamento para cada um dos compostos seja possível e facilitado. O procedimento é similar ao apresentado no Capítulo 5 e visa somente reforçar e complementar as discussões finais.

### A.1 Composto 6CB

Iniciamos os registros seguindo um padrão crescente no número  $n$  da série. Dessa forma, organizando os valores das constantes elásticas em função da temperatura reduzida para o primeiro composto, o 6CB, tem-se:

**Tabela A.1** – Constantes elásticas em função da temperatura, temperatura reduzida e valores para as razões entre as constantes elásticas para o composto 6CB.

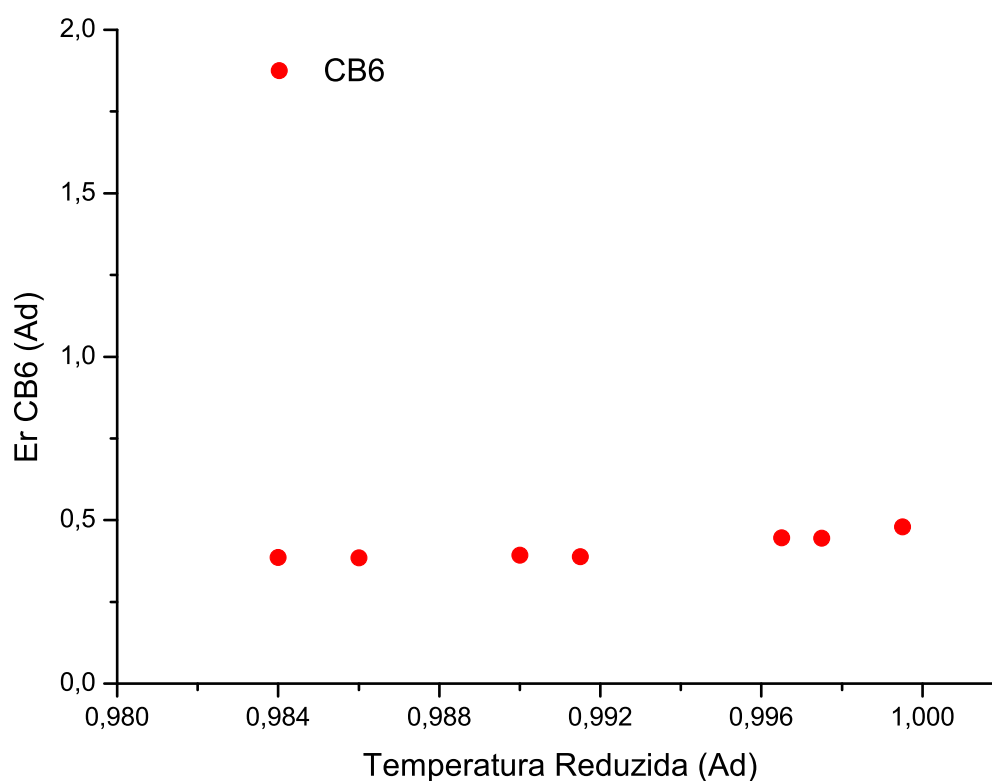
$K_{11}$	$K_{22}$	$K_{33}$	Temperatura Reduzida	$r_{21} (K_{22}/K_{11})$	$r_{31} (K_{33}/K_{11})$
0,84	0,3	1,01	0,9995	0,35714	1,20238
1,03	0,36	1,27	0,9975	0,34951	1,23301
1,12	0,38	1,36	0,9965	0,33929	1,21429
1,47	0,45	1,82	0,9915	0,30612	1,2381
1,52	0,47	1,88	0,99	0,30921	1,23684
1,67	0,52	2,09	0,986	0,31138	1,2515
1,77	0,55	2,21	0,984	0,31073	1,24859

Diretamente da tabela, observa-se que o comportamento das razões  $R_{21}$  e de  $R_{31}$  é praticamente constante. Devemos esperar um comportamento constante para a relação  $E_r$  durante a maior parte da fase nemática.

Para analisarmos esse comportamento, realizamos então o registro gráfico, Fig. A.1. O comportamento do 6CB novamente permanece constante durante quase toda a fase nemática, entretanto, rapidamente converge para o valor teórico próximo a transição de fase nemático-isotrópico.

Para os demais compostos, 7CB e 8CB, o mesmo comportamento será

observado, divergindo levemente apenas nos valores de  $E_r$  e na convergência próximo a transição de fase.



**Figura A.1** – Gráfico construído a partir das constantes elásticas, do composto 6CB, em função da temperatura

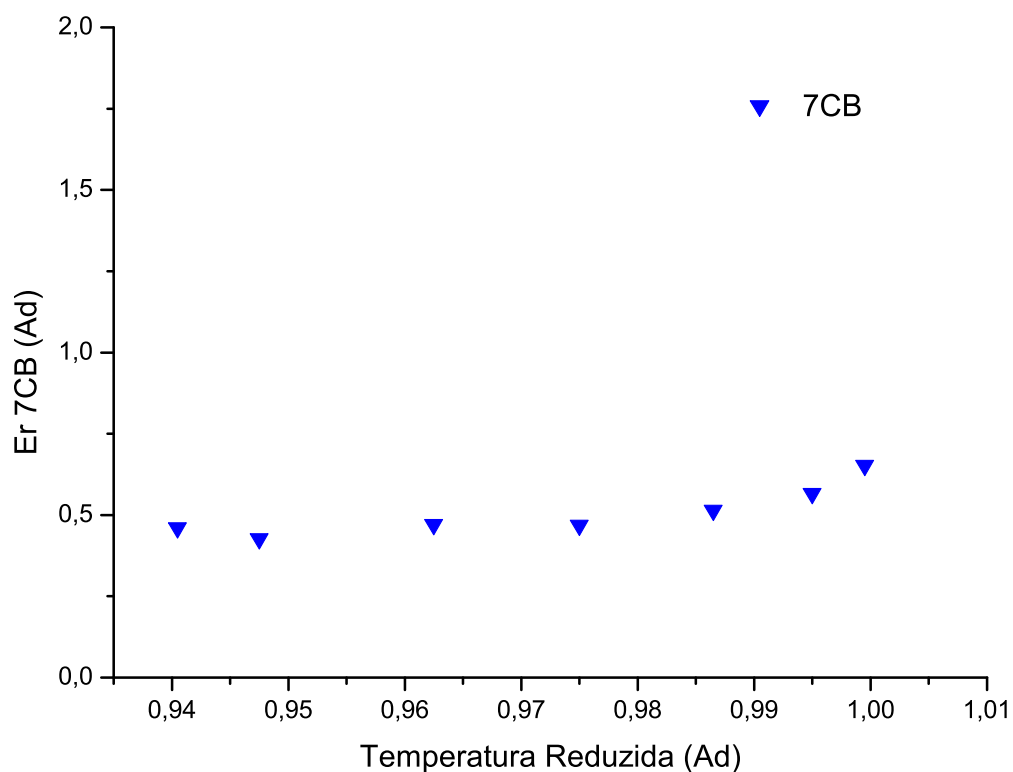
## A.2 Composto 7CB

Para o composto 7CB, os dados experimentais das constantes elásticas possibilitam o seguinte registro:

**Tabela A.2** – Constantes elásticas em função da temperatura, temperatura reduzida e valores para as razões entre as constantes elásticas para o composto 7CB.

$K_{11}$	$K_{22}$	$K_{33}$	Temperatura Reduzida	$r_{21} (K_{22}/K_{11})$	$r_{31} (K_{33}/K_{11})$
0,96	0,45	1,13	0,9995	0,46875	1,17708
1,22	0,52	1,47	0,995	0,42623	1,20492
1,68	0,69	2,08	0,9865	0,41071	1,2381
2,15	0,8	2,66	0,975	0,37209	1,23721
2,48	0,92	3,06	0,9625	0,37097	1,23387
3,04	1,05	3,8	0,9475	0,34539	1,25
3,34	1,25	4,18	0,9405	0,37425	1,2515

e graficamente encontra-se;



**Figura A.2** – Distribuição dos dados experimentais registrados na Tabela A.2, representando a concordância e o comportamento das constantes elásticas obtidas a partir da relação  $E_r$  em função da temperatura para o composto  $7CB$ .

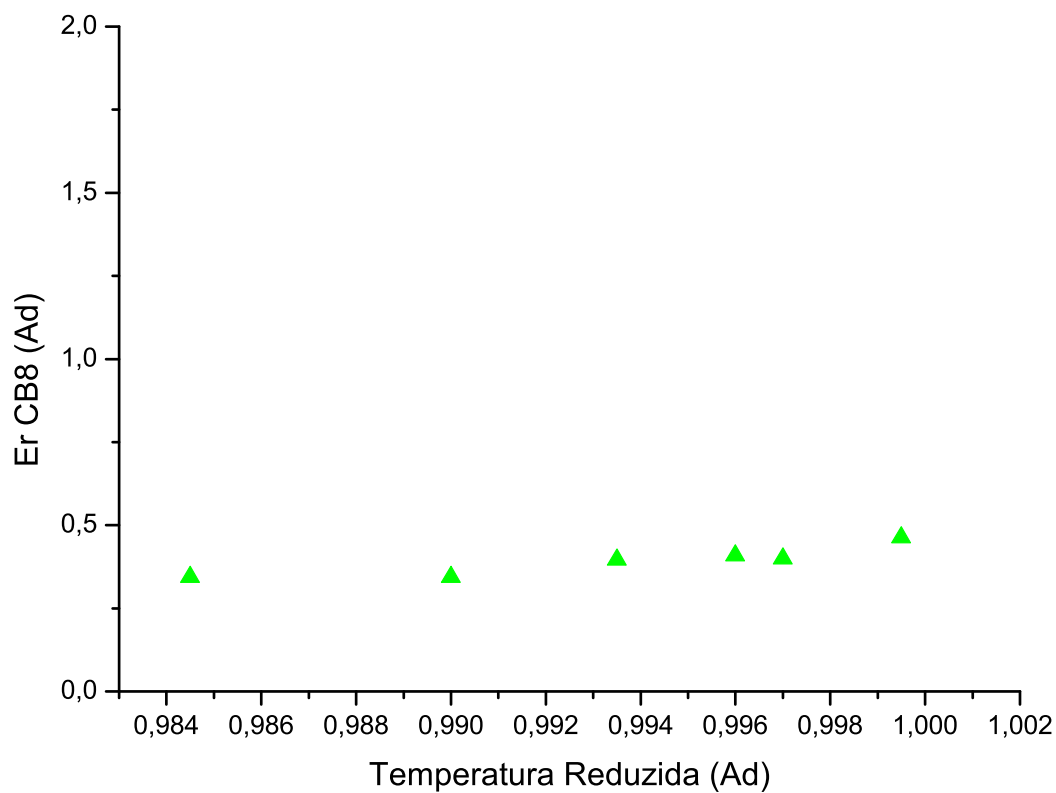
### A.3 Composto $8CB$

Para  $8CB$  temos os seguintes dados experimentais registrados, além dos resultados para as razões entre as constantes elásticas;

**Tabela A.3** – Constantes elásticas em função da temperatura, temperatura reduzida e valores para as razões entre as constantes elásticas para o composto  $8CB$ .

$K_{11}$	$K_{22}$	$K_{33}$	Temperatura Reduzida	$r_{21} (K_{22}/K_{11})$	$r_{31} (K_{33}/K_{11})$
1,06	0,35	1,25	0,9995	0,33019	1,17925
1,51	0,45	1,82	0,997	0,29801	1,2053
1,58	0,48	1,9	0,996	0,3038	1,20253
1,71	0,52	2,09	0,9935	0,30409	1,22222
1,98	0,55	2,48	0,99	0,27778	1,25253
2,27	0,63	2,84	0,9845	0,27753	1,2511

e de maneira similar, a todos os registros anteriores:



**Figura A.3** – Distribuição dos dados experimentais registrados na Tabela A.3, representando a concordância entre a relação  $E_r$  medidas em função da temperatura para o composto 8CB.

# Apêndice B

## Propriedades Das Formas Fundamentais

Esse segundo apêndice tem por objetivo apresentar alguns exemplos relacionados as formas fundamentais de uma superfície.

Esses tópicos não foram apresentados no decorrer do texto simplesmente para que a leitura fluísse melhor, além é claro, de não ser de extrema relevância no contexto.

### B.1 Pontos De Máximo E Mínimo

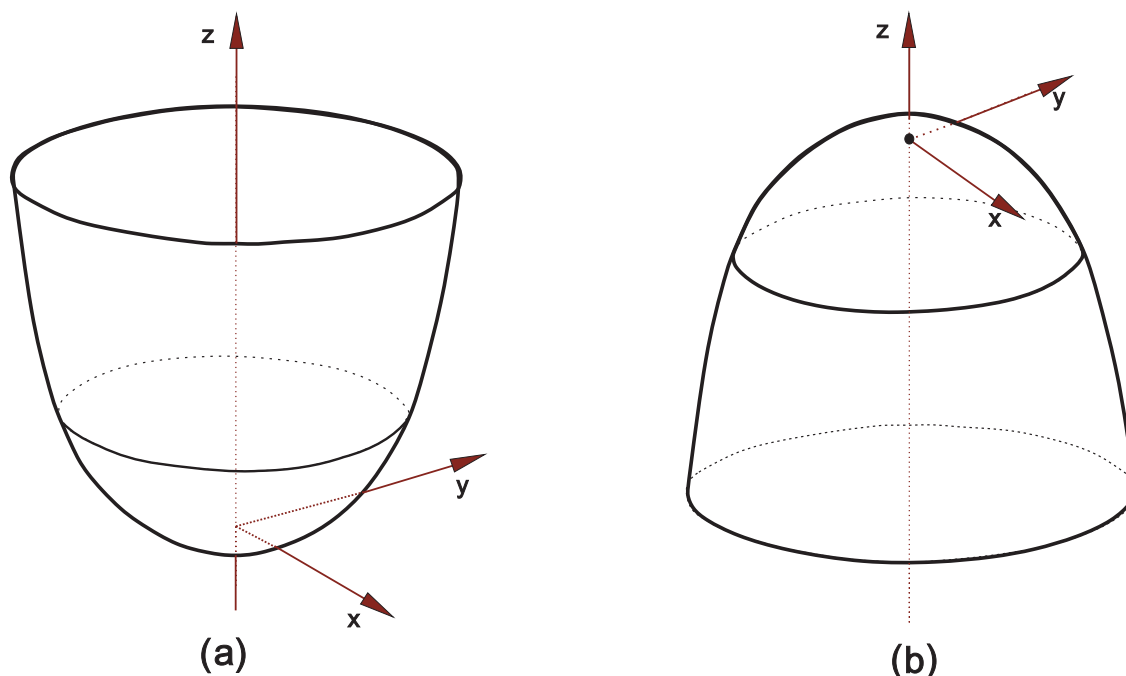
A curvatura normal e a curvatura gaussiana possuem o sinal dependente apenas da segunda forma fundamental, visto que, a primeira forma quadrática é positivo definida, pois, como mostrado anteriormente, ela é  $dl^2$  (módulo positivo para números reais).

Dessa maneira, uma avaliação de máximos e mínimos pode ser feita ao se observar o sinal da forma quadrática  $II$ . Considerando as seguintes situações, para  $I > 0$ :

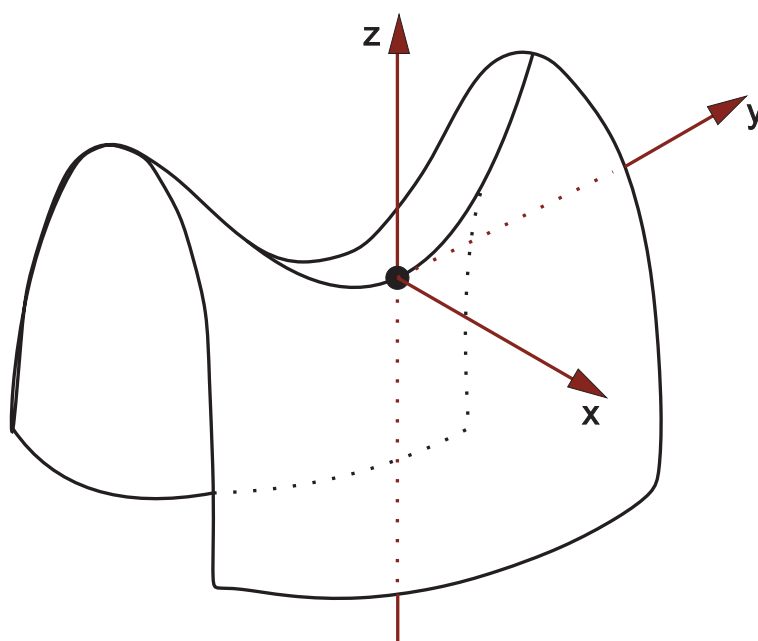
1.  $eg - f^2 > 0$ : Um ponto de máximo ou mínimo local, isto é, a superfície se curva igualmente em todas as direções, para baixo ou para cima, dependendo do sinal da derivada  $r_{\mu\mu}$  (ponto elíptico).
2.  $eg - f^2 = 0$ : Parabólico; a superfície comporta-se com no ponto como um ponto elíptico, exceto em uma das direções em que  $k_n = 0$ .
3.  $eg - f^2 < 0$ : Essa condição diz que  $II$  é indefinida, pois não mantém o sinal para todas as direções. Essa situação é típica de um ponto de sela.

As figuras B.1 (a) e B.1 (b) são representações para as condições listadas em= 1. A primeira das figuras apresenta um ponto de mínimo, enquanto que a segunda um ponto de máximo. O ponto elíptico sobre as superfícies possuem curvas passando através de tal forma que as direções principais se curvam com a mesma intensidade em todas as direções.

A figura B.2 é uma representação de uma sela, no qual o ponto na origem do sistema de coordenadas coincide com o chamado ponto de sela, em que a segunda forma, que nos fornece a direção na qual as linhas principais se curvam, possui valores diferentes.



**Figura B.1** – Representação de superfícies com pontos elípticos, onde a superfície curva-se em todas as direções por igual. A ilustração (a) representa uma superfície com mínimo local enquanto que a superfície (b) possui um máximo, sendo ambos os pontos elípticos.



**Figura B.2** – Representação de uma superfície com um ponto de sela, em que a segunda forma possui sinais diferentes dependendo da direção. Imagem adaptada de [24].

Vamos então considerar um exemplo afim de ilustrar os cálculos dos coeficientes das formas fundamentais e conseqüentemente a avaliação dos pontos de máximo ou mínimo.

## B.2 Cálculo Das Formas Fundamentais I E II E Suas Propriedades Para Uma Superfície $z = f(x, y)$ .

**Exemplo B.1** *Uma superfície esférica dada por  $z = f(x, y)$ . Escrevendo essa função em relação aos parâmetros  $\theta$  e  $\phi$ , os vetores tangentes serão:*

$$\begin{aligned} r(\theta) &= (a \cos \theta \cos \phi) e_1 + (a \cos \theta \sin \phi) e_2 + (-a \sin \theta) e_3 \\ r(\phi) &= (-a \sin \theta \sin \phi) e_1 + (a \sin \theta \cos \phi) e_2 + (0) e_3 \end{aligned}$$

em que  $a$  é o raio da esfera. O elemento de arco é dado por:

$$dl^2 = a^2 d\theta^2 + a^2 \sin^2 \theta d\phi^2$$

assim os coeficientes de  $I$  são:  $E = a^2$ ,  $F = 0$  e  $G = a^2 \sin^2 \theta$ . Para a segunda forma fundamental:

$$II = a d\theta^2 + a \sin^2 \theta d\phi^2$$

Calculando os determinantes, a curvatura gaussiana é dada por  $K = 1/a^2$ , em que as curvaturas principais (associadas as direções principais) são  $1/a$ . Como a forma  $I$  é positiva, o sinal de  $K$  depende de  $II$ . Assim eg  $-f^2 > 0$ , ou seja,  $a^2 \sin^2 \theta > 0$ . Nesse caso temos um ponto elíptico e a superfície esférica curva-se igualmente em todas as direções.

