



**UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE
MÉXICO**

FACULTAD DE INGENIERÍA

**“EFECTO ELECTRO-REOLÓGICO Y
COMPORTAMIENTO NO NEWTONIANO EN UNA
CELDA HÍBRIDA NEMÁTICA”**

T E S I S

QUE PARA OBTENER EL GRADO DE:

INGENIERO MECÁNICO

PRESENTA:

ÁNGEL DAVID GUILLÉN VALENCIA

DIRECTOR: DR. CARLOS IGNACIO MENDOZA RUIZ



MÉXICO, D.F., 2007



Universidad Nacional
Autónoma de México

Dirección General de Bibliotecas de la UNAM

Biblioteca Central



UNAM – Dirección General de Bibliotecas
Tesis Digitales
Restricciones de uso

DERECHOS RESERVADOS ©
PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL

Todo el material contenido en esta tesis esta protegido por la Ley Federal del Derecho de Autor (LFDA) de los Estados Unidos Mexicanos (México).

El uso de imágenes, fragmentos de videos, y demás material que sea objeto de protección de los derechos de autor, será exclusivamente para fines educativos e informativos y deberá citar la fuente donde la obtuvo mencionando el autor o autores. Cualquier uso distinto como el lucro, reproducción, edición o modificación, será perseguido y sancionado por el respectivo titular de los Derechos de Autor.

DEDICATORIAS

A Papá

*Un paso aquí, otro allá, pero siempre adelante como tu lo haces.
Este es sólo un pequeño fruto de los muchos que has sembrado,
gracias por apoyarme y darme siempre lo mejor de ti. “Lo logramos”*

A Mamá

*Tu aliento tácito y silencioso, siempre constante e incondicional
son cimientos importantes de este pequeño logro,
nuestro logro. Gracias mamá.*

Agradecimientos

A la Universidad Nacional Autónoma de México y a su Facultad de Ingeniería

Por fomentar mi desarrollo en un espacio tan maravilloso, por brindarme la oportunidad de tener una educación de calidad y por que me permitieron cumplir mi sueño de ser Ingeniero. Gracias, mi compromiso y cariño hacia ustedes será eterno.

A la Dirección General de Asuntos del Personal Académico (DGAPA) y al Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología (CONACYT)

Por el apoyo tan valioso brindado a través de la beca DGAPA IN-110103 y por el equipo de cómputo facilitado en este proyecto a través del financiamiento CONACYT 43596-F. Este pequeño trabajo no sería al mismo sin su apoyo, GRACIAS.

Al Dr. Carlos I. Mendoza Ruiz

Por su paciencia y dedicación, por sus consejos y valiosas enseñanzas, por su enorme compromiso en este proyecto, por su entusiasmo, esfuerzo extra y por ser mi maestro y amigo. Siempre tendrá mi admiración y respeto.

A mi hermana Gloria

Por todas las ideas tan sugerentes que me diste, por el entusiasmo y apoyo brindado y por que desde siempre has depositado en mi pequeños granitos de arena esenciales en mi vida. Enorme es la deuda que tengo hacia ti. Gracias Glorita.

A mis amigos

Gloria-Borre, Juan-Carlos-Juco, Wendy-Principesa, Ángeles-Angy, Tonatiuh-Tonatiuh, Ofelia-Ofelofe, Maestro-David, Alan-15-varos e Isaías. Les agradezco de manera muy sincera y especial todo el apoyo, todos los consejos y sugerencias, las porras, las ideas y todo lo demás. . . De corazón, GRACIAS.



<i>CONTENIDO</i>	<i>Página</i>
INTRODUCCIÓN	1
1. ANTECEDENTES	1
1.1 Breve historia de los Cristales Líquidos	4
1.2 ¿Qué es un Cristal Líquido?	6
1.3 Descripción general de la estructura química de los Cristales Líquidos	7
1.4 Clasificaciones de los Cristales Líquidos	10
1.4.1 Clasificación de los Cristales Líquidos según la geometrías de las moléculas	11
1.4.2 Clasificación de los Cristales Líquidos según el modo de aparición de las propiedades liquido-cristalinas	12
1.5 Celda híbrida	18
1.6 Fluidos Electro-reológicos	20
2. PROPIEDADES DIELECTRICAS Y ELÁSTICAS DE LOS CRISTALES LÍQUIDOS NEMÁTICOS	22
2.1 Propiedades elásticas de los Cristales Líquidos Nemáticos	22
2.2 Propiedades eléctricas y campos eléctricos en los Cristales Líquidos Nemáticos	26
3. ESTUDIO DE MECÁNICA DE FLUIDOS	27
3.1 Viscosidad dinámica	27
3.2 Fluidos Newtonianos y no Newtonianos	29
3.3 Viscosidad aparente	29
3.4 Fluidos dilatantes y pseudoplásticos (Fenómenos de “Shear thinning” y “Shear thickening”)	30
3.5 Tensor de esfuerzos	32
3.6 Primera diferencia normal de esfuerzos	34
3.7 Teoría del continuo en Cristales Líquidos Nemáticos (Nematodinámica)	36
3.8 Coeficientes de Miesowicz	37



<i>CONTENIDO</i>	<i>Página</i>
4. EFECTO ELECTRO-REOLÓGICO Y COMPORTAMIENTO NO NEWTONIANO DE UN CRISTAL LIQUIDO NEMÁTICO DENTRO DE EN UNA CELDA HÍBRIDA	39
4.1 Modelo de celda híbrida	40
4.1.1 Par en las moléculas de un Cristal Líquido inducido por un flujo de corte	41
4.1.2 Par en las moléculas de un Cristal Líquido debido a un campo eléctrico	43
4.1.3 Par en las moléculas de un Cristal Líquido debido a las fuerzas elásticas	44
4.1.4 Equilibrio de momentos en un Cristal Líquido dentro de una celda híbrida	45
4.1.5 Cambio en la velocidad del Cristal Líquido	46
4.1.6 Orientación del director dentro de la celda híbrida	46
4.1.7 Velocidad de flujo del Cristal Líquido	48
4.2 Método numérico de solución	49
4.3 Resultados	52
4.3.1 Variación del ángulo del director como función de la posición dentro de la celda híbrida	52
4.3.2 Perfil de velocidades del Cristal Líquido	56
4.3.3 Viscosidad del Cristal Líquido dentro de la celda híbrida	58
4.3.4 Viscosidad promedio	61
4.3.5 Primera diferencia normal de esfuerzos	64
4.3.6 Primera diferencia normal de esfuerzos promedio	67
4.3.7 Esfuerzo Cortante	69
5. CONCLUSIONES	70
BIBLIOGRAFÍA	73



INTRODUCCIÓN

Los cristales líquidos (CL) son sustancias que presentan características físicas de la fase sólida y líquida simultáneamente, ya que adoptan la forma del recipiente que los contiene (como los líquidos), pero sus moléculas se disponen de modo regular como sucede en los cristales. Una característica importante en estos materiales es que en ellos es posible cambiar en propiedades físicas (viscosidad, color, configuración interna, anisotropía, propiedades ópticas etc.) en presencia de un estímulo externo como campos eléctricos, magnéticos o variación de la temperatura. Este cambio en sus propiedades es casi exclusivo de estos materiales y tienen múltiples aplicaciones tanto en dispositivos habituales de nuestra vida diaria como en sistemas del ramo industrial, médico y comercial. Ejemplos de esta aseveración son las carátulas de agendas electrónicas, de calculadoras, cámaras de video, teléfonos móviles y muchos otros dispositivos de uso común en nuestros días; en cuanto al sector médico, algunos ejemplos de sistemas que utilizan las propiedades reológicas de los CL's es la aplicación de estos materiales dentro de amortiguadores para la rehabilitación de pacientes con problemas motrices [1,2], en estos se controla con pequeños campos eléctricos la viscosidad del CL dentro del amortiguador (efecto electro-reológico) con el fin de graduar el amortiguamiento conforme avanza la rehabilitación de los pacientes sin la necesidad de hacer ajustes mecánicos en el sistema.

En los últimos años un tipo particular de CL llamado "nemático" ha tenido gran relevancia en la ciencia y la tecnología y ha presentado un número importante de aplicaciones en muchos de los dispositivos electrónicos contemporáneos. De estos destaca la tecnología de la última generación de pantallas planas (en televisores y computadoras), en donde gracias a la aplicación de un campo eléctrico a través del CL es posible modificar la disposición de sus moléculas y con ello cambiar la forma de refleja o transmitir la luz, logrando con ello proyectar una imagen muy clara y



nítida, con excelente resolución y ángulos de visión. Por otra parte, ejemplos del uso de CL's nemáticos en el sector industrial son algunos sistemas de micro-válvulas donde se hace indispensable el uso de CL's debido a que además de tener un manejo (a través de campos eléctricos) rápido y sencillo, el tiempo de respuesta de estos materiales dentro de los sistemas es del orden de milisegundos [3]. Es debido a estas características de respuesta y a la posibilidad de modificar sus propiedades reológicas, que los CL's nemáticos también se usan en algunos equipos de control, robótica, sistemas hidráulicos, sistemas de embragues y frenos entre otros.

Aunque estas propiedades reológicas también se presentan en otros fluidos conocidos como fluidos electro-reológicos coloidales [4], en aplicaciones a micro escala, el uso de estos fluidos representa desventajas en comparación con los CL's. Un ejemplo de este hecho son los sistemas de micro-canales donde se requiere un fluido de trabajo al cual se pueda controlar su viscosidad, aquí el uso de fluidos electro-reológicos coloidales está restringido debido a que sus partículas en suspensión tienen una acción abrasiva dentro del sistema y provocan una fácil obstrucción y desgaste de los micro-canales, es debido a ello que el uso de CL's en estos sistemas es casi exclusivo.

La ciencia de los CL's es una de las más jóvenes ramas de la física y aunque cada vez es más frecuente encontrar el uso de estos materiales en aplicaciones tecnológicas, aún se desconoce mucho de la manera en como se comportan estos materiales ante la influencia de agentes externos como la variación de temperatura, la aplicación de campos magnéticos y eléctricos y la combinación de estos efectos, si bien son numerosos los estudios actuales sobre el comportamiento físico de dichos materiales [1-3, 5-8], aun se desconoce mucho de las propiedades mencionadas y del comportamiento general de estos fluidos ante diferentes condiciones de trabajo.



De lo anterior podemos afirmar que son dos las razones fundamentales las que justifican el estudio de estos materiales: desde el punto de vista científico, resulta valioso profundizar en la investigación del comportamiento de las propiedades físicas en estos materiales para incrementar el caudal de información sobre ellas y con ello dar pie a nuevos conocimientos que impulsen el uso de estos nuevos materiales; mientras que desde el punto de vista tecnológico, resulta muy atractiva la oportunidad de descubrir, entender y con ello lograr manipular la manera exacta la forma en que operan las propiedades físicas tan singulares e intrigantes de estas substancias, para así poder aplicarlas en dispositivos que promuevan la generación de nuevas tecnologías en beneficio del hombre.

Teniendo en cuenta los aspectos anteriores, este trabajo de tesis tiene como objetivo estudiar las propiedades reológicas del cristal líquido nemático "5CB" (4-n-penil-4-cianobipenil) confinado dentro de una celda híbrida bajo los efectos variables de un campo eléctrico y un flujo cortante. Para ello se dará primero una pequeña introducción sobre aspectos físicos fundamentales de los CL's como son sus propiedades elásticas y su estructura química, haciendo un especial énfasis hacia los del tipo nemático que son los de particular interés en este trabajo. Posteriormente se analizará el efecto electror-reológico que gobierna el comportamiento del CL dentro de una celda híbrida donde se examinarán entre otras cosas el cambio en la viscosidad aparente del cristal líquido y su relación con la orientación de las moléculas dentro del sistema. Finalmente se expondrán los resultados obtenidos y a partir de ellos se harán las conclusiones.



INTRODUCCIÓN

Teniendo en cuenta los aspectos anteriores, este trabajo de tesis tiene como objetivo estudiar las propiedades reológicas del cristal líquido nemático "5CB" (4-n-penil-4-cianobipenil) confinado dentro de una celda híbrida bajo los efectos variables de un campo eléctrico y un flujo cortante. Para ello se dará primero una pequeña introducción sobre aspectos físicos fundamentales de los CL's como son sus propiedades elásticas y su estructura química, haciendo un especial énfasis hacia los del tipo nemático que son los de particular interés en este trabajo. Posteriormente se analizará el efecto electror-reológico que gobierna el comportamiento del CL dentro de una celda híbrida donde se examinarán entre otras cosas el cambio en la viscosidad aparente del cristal líquido y su relación con la orientación de las moléculas dentro del sistema. Finalmente se expondrán los resultados obtenidos y a partir de ellos se harán las conclusiones.



EFFECTO ELECTRO-REOLÓGICO Y COMPORTAMIENTO NO NEWTONIANO EN UNA CELDA HÍBRIDA NEMÁTICA

CAPITULO 1

ANTECEDENTES

1.1 Breve historia de los Cristales Líquidos

A finales del siglo XIX, después de más de doscientos años en que Antonio Van Leeuwenhoek inventara el microscopio (1667), muchos científicos e investigadores dedicaban sus estudios a la observación de minerales, insectos, plantas y un sin fin de objetos que hasta la fecha eran microscópicamente desconocidos; uno de estos científicos fue el botánico austriaco Friedrich Reinitzer, quien en 1888 estudiando funciones biológicas de derivados del colesterol en las plantas, observó a través del microscopio una muestra de “*benzoato de colesterilo*”¹ mientras esta se derretía; Reinitzer se percató que dicha muestra aparentemente exhibía dos puntos de fusión: primero a 145.5 °C la muestra se fundía dando lugar a un fluido denso y opaco, y al aumentar la temperatura a 178.5 °C, la muestra se transformaba en un líquido transparente como el agua [9] (Fig. 1.1). Reinitzer envió muestras de tan intrigante sustancia al profesor alemán de filosofía natural (física) Otto Lehmann, especializado en estudios de cristalización en compuestos y quien con ayuda de un microscopio en cuya base era posible variar y controlar la temperatura en un rango determinado, logró observar la cristalización de la muestra bajo condiciones controladas. Lehmann, analizando las propiedades de la sustancia observó que ésta fluía (como un líquido) pero presentaba propiedades ópticas parecidas a las de un cristal; para referirlas Lehmann al inicio las llamó “Cristales Blandos”, después usó el

¹ *Molécula natural compuesta primordialmente de átomos de carbón e hidrógeno presente en animales y plantas.*



término de “Fluidos Cristalinos”. Los subsecuentes estudios establecieron que estas observaciones de una fase intermedia representaban un nuevo estado termodinámico de la materia, fue entonces cuando se abrió una nueva área de investigación: el estudio de los Cristales Líquidos (CL's) [9-11].

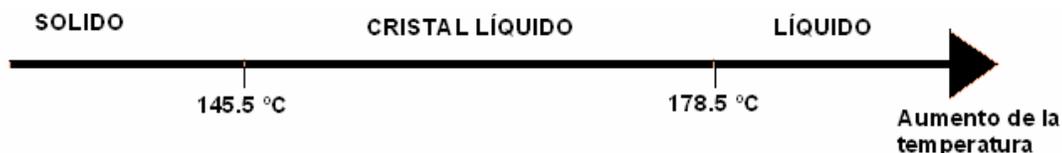


Fig. 1.1 *Diagrama de fases del “Benzoato de Colesterilo”. La fase gaseosa no se muestra ya que la molécula se descompone a altas temperaturas.*

Inmediatamente después de su descubrimiento, los CL's no tuvieron una trascendencia importante debido a lo desconocido de sus propiedades, además debido al periodo de inestabilidad mundial que se dio después de su hallazgo (Primera y Segunda Guerras Mundiales) su estudio se retrasó y solo se mantuvieron como una simple curiosidad de laboratorio.

No es sino hasta más de medio siglo después de su descubrimiento cuando el holandés Carl W. Oseen y el checo Hans Zöcher, logran crear la primera teoría (estática) de estos materiales y mas tarde V. K. Frederiks y V. N. Tsvetkov en la extinta URSS consiguen estudiar por vez primera las propiedades eléctricas y ópticas de dichos materiales. Gracias a estos estudios comienza la difusión de las singulares propiedades físicas de los CL's y es en la década de los 60's cuando con la fundación del “Liquid Crystal Institute” en Kent, Estados Unidos (por Glenn Brown) y la publicación del “Full-Length Book” por el químico Británico George Gray, que se difunden las inmensas posibilidades de aplicación de los CL's en el campo de la visualización de imágenes [19].

En los últimos treinta años se ha demostrado que estas sustancias ocupan un lugar único en la naturaleza ya que desempeñan un papel fundamental en los organismos



vivos, por ejemplo, en el ADN existen diversas fases líquido-cristalinas y los fosfolípidos² conforman fases de CL's [12]. Por otra parte, estas sustancias son aplicables en infinidad de dispositivos tecnológicos y hasta el día de hoy no se ha descubierto material alguna que pueda sustituirlos [13].

1.2 ¿Qué es un Cristal Líquido?

Las moléculas que forman un sólido se encuentran ordenadas y ocupan posiciones bien definidas, lo que les permite tener forma y volumen definido. En un fluido las partículas no poseen un orden fijo, sino que están dispuestas al azar y cambian de posición constantemente, en consecuencia no tienen forma propia sino que adoptan la del recipiente que los contiene. Los CL's tienen la movilidad de un líquido (toman la forma del recipiente que los contiene) pero presentan un orden en el arreglo de sus moléculas intermedio entre las estructuras en tercera dimensión de los sólidos cristalinos y el desorden molecular de los líquidos, es decir, sus moléculas presentan una ligera tendencia a apuntar más en una dirección que en otra o a estar más tiempo en ciertas posiciones que en otras manteniendo así algún grado de orientación, orden y algunas veces orden orientacional³ [10,11].

Debido a estas características tan inusuales, los CL's también son conocidos como materiales "mesomórficos" o "paracristalinos" y como ocurre en otros sistemas cristalinos, en los CL's también podemos encontrar diferentes estructuras para un mismo material las cuales dependen de las condiciones del entorno. A la variedad de fases que pueden existir en estos materiales, se les conoce como "mesofases" (del griego: meso = entre).

² Principal componente de la membrana celular.

³ Disposición de las moléculas caracterizada por ocupar siempre solamente una cierta posición, la cual esta restringida por ellas mismas (unas con respecto a otras).



Estos materiales paracristalinos son anisotrópicos dada su orientación, por lo cual sus propiedades físicas dependen de la dirección en que éstas se miden, por ejemplo: para el caso de los CL's tipo nemático que presentan geometría molecular alargada en forma de barra (como se verá en las secciones 1.3 y 1.4 de éste trabajo),

su viscosidad se torna menor en la dirección paralela a sus moléculas que en la dirección transversal debido a que éstas requieren menor energía para deslizarse unas respecto a otras a lo largo de sus ejes longitudinales que para moverse de manera perpendicular a los mismos. Por otra parte, los CL's se convierten en líquidos isótropos cuando se calientan por encima de una temperatura característica, ya que entonces las moléculas tienen la suficiente energía para superar las atracciones que restringen su movimiento.

Todas las propiedades físicas de los CL's como constantes dieléctricas, viscosidad, absorción espectral, temperatura de transición, anisotropía y características ópticas dependen en primera instancia de su constitución molecular, es decir, dos CL's con geometrías moleculares similares, pueden presentar propiedades físicas distintas si el tipo de moléculas que los forman son distintas; es por esto que si se desea entender el comportamiento de sus características físicas es necesario entender primero la constitución de sus moléculas.

1.3 Descripción general de la estructura química de los Cristales Líquidos

Las fases de los CL's pueden formarse por moléculas que presentan formas diferentes. La estructura básica y más común de una molécula de CL nemático se muestra en la Fig. 1.2; en ella el CL esta compuesto en un extremo por una cadena lateral "R", dos o mas anillos aromáticos A y A' conectados por grupos de enlaces "X" y en el extremo opuesto un grupo terminal "R'". Ejemplos de la cadenas laterales "R" y de los conjuntos terminales "R'"son los grupos alKilo (C_nH_{2n+1}) y

“alkoxy” ($C_nH_{2n+1}O$); los enlaces “X” son enlaces simples o grupos semejantes al “etileno” ($-H=H-$), “azobenceno” ($-N=N-$) y “éster” ($O=O-$) entre otros; dentro de los anillos aromáticos están los ciclohexanos saturados (penil, pirimidil y tiopenil) e insaturados en distintas combinaciones [14, 34].

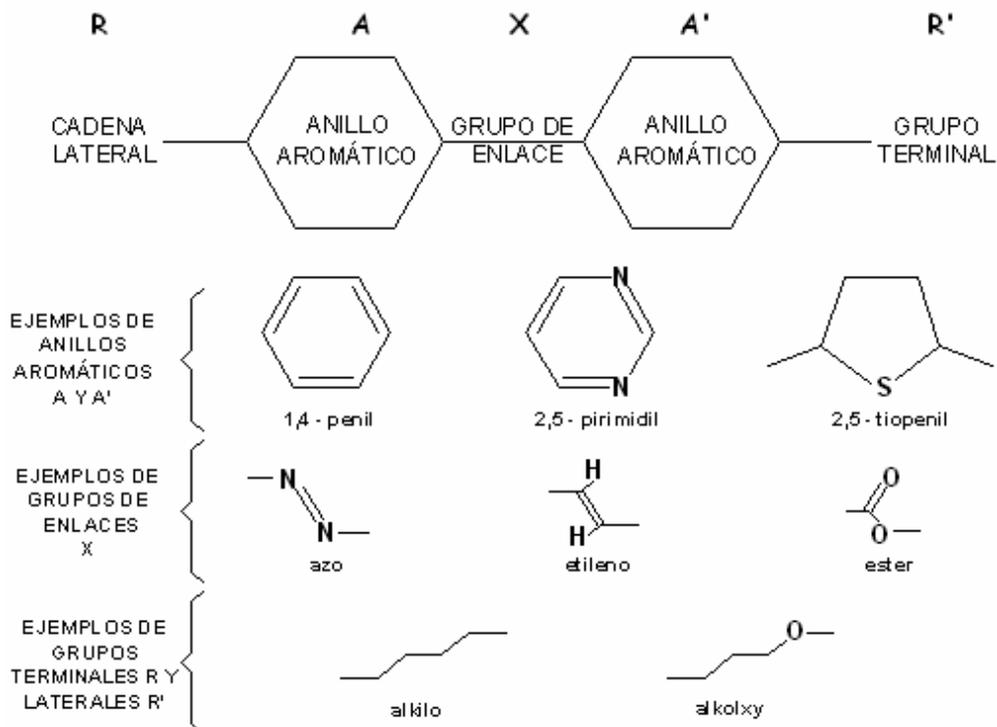


Fig. 1.2 Estructuras básicas más comunes de una molécula de cristal líquido nemático.

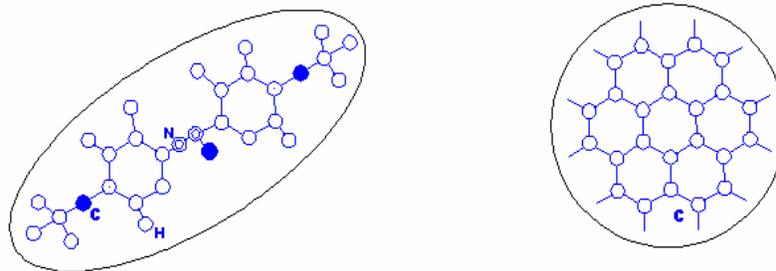
El grupo terminal “R” es el responsable de la alteración en la transición de temperaturas en el CL ya que por ejemplo, debido a la ocasional adición de un átomo de carbono en dicha cadena Terminal, se provoca un alargamiento de la misma y con ello el efecto de la temperatura en el CL es menor [15].

El tamaño, polaridad, posición y naturaleza de la cadena lateral R afecta la estabilidad de las fases, ya que puede provoca un ensanchamiento de la molécula reduciendo la atracción lateral y de ésta forma disminuir la estabilidad de la misma. Por otra parte, los grupos de enlaces “X” pueden alargar o acortar la molécula del CL influyendo de ésta forma en la polarización y flexibilidad del mismo [15].

Tabla 1.1 *Influencia de los sistemas de anillos en la molécula del CL 4-cinofenol.*

Tipo de anillo en el CL	Valor de la Anisotropía Dieléctrica “ ϵ_a ”	Constantes elásticas K_3/K_1
Biciclo octano	11.5	1.3
Penil	9.7	1.6
Penil Pirinidine	19.7	1.2
Penil cicloexano	13.3	1.4

Los sistemas de anillos son los que más afectan las propiedades del CL ya que influye en el valor de la anisotropía dieléctrica⁴, estabilidad química, birrefringencia⁵, temperatura de transición, valor de las constantes elásticas y viscosidad del cristal. Un ejemplo de la forma en como los sistemas de anillos afectan las propiedades de los CL's se muestra en la tabla 1.1 donde para distintos tipos de anillos, se aprecia como se modifican los valores de las constantes elásticas y la anisotropía dieléctrica en la molécula del CL [15].

Fig. 1.3 *Forma de las moléculas de los CL's.*

Por otra parte, debido a su estructura química, la geometría de las moléculas de los CL's es en algunos casos larga y anisotrópica y en otros presenta una forma hexagonal planar, por lo cual resulta bastante compleja para su estudio ya que es prácticamente imposible tratar todas las posibles variaciones de su arquitectura y

⁴ Fenómeno que ocurre cuando la distribución de cargas a lo largo de la molécula de CL responde de manera distinta entre las componentes paralela y perpendicular de un campo eléctrico aplicado.

⁵ Característica óptica de un material que permite que las polarizaciones de la luz viajen a diversas velocidades.



por ende, las diferencias en sus propiedades físicas; es por esta razón que para su estudio se modelan como si tuviesen una geometría de barra y de disco (Fig. 1.3). Las estructuras y el orden molecular de los CL's pueden ser alteradas mediante la aplicación de deformaciones y de esfuerzos cortantes, por esta razón las propiedades reológicas son de gran ayuda para caracterizar este tipo de estructuras [15].

1.4 Clasificaciones de los Cristales Líquidos

Existen distintos criterios (no excluyentes) para clasificar los CL's, algunos de ellos son según la manera en como se forman (modo de aparición), o la forma de la geometría de sus moléculas, estos criterios de clasificación se muestran en la Fig.1.4

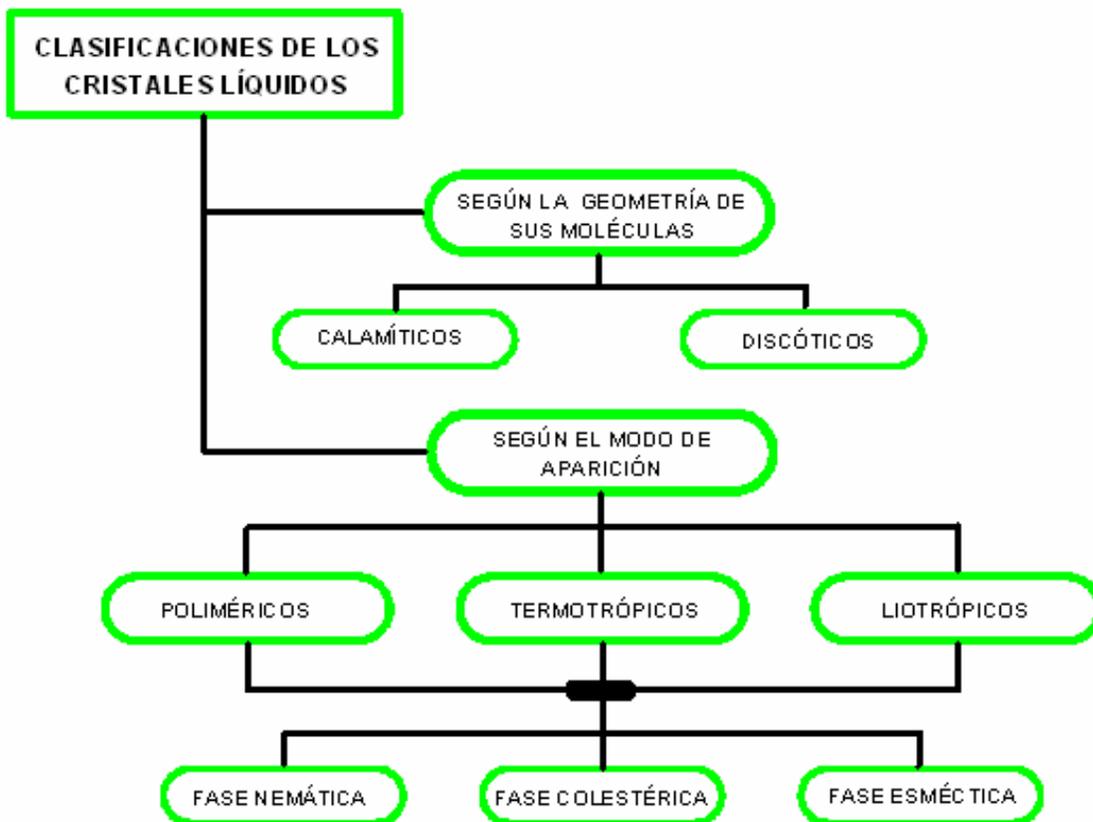


Fig. 1.4 Diferentes criterios de clasificación de los cristales líquidos.



1.4.1 Clasificación de los CL's según la geometría de las moléculas

CRISTALES LÍQUIDOS CALAMÍTICOS: Éstos se caracterizan por tener moléculas con un eje mucho más largo que los otros, por lo cual para su estudio se modelan con una geometría de “varilla” o “barra”. Este tipo de CL's guardan un orden de orientación en dirección a los ejes más largos de las moléculas (Fig. 1.5).

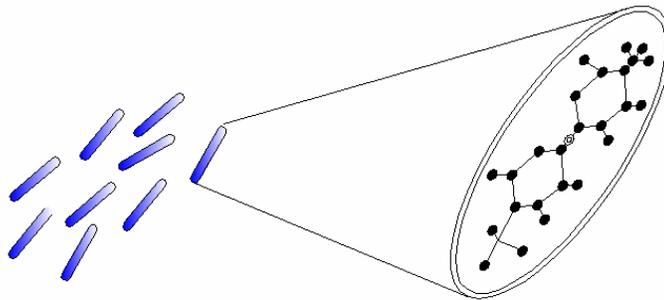


Fig. 1.5 *Ejemplo de orientación en CL's tipo Calamíticos.*

CRISTALES LÍQUIDOS DISCÓTICOS: Estos presentan arquitectura molecular en forma de discos, es decir, tienen un eje mucho más corto que los otros y se alinean en dirección a los ejes más breves de las moléculas formando columnas apiladas, las cuales se aglomeran formando geometrías hexagonales que agrupan una matriz cristalina bidimensional. Las moléculas dentro de cada columna están algo ordenadas con respecto a sí, pero no hay ninguna correlación de posición entre moléculas en columnas diferentes. (Fig. 1.6).

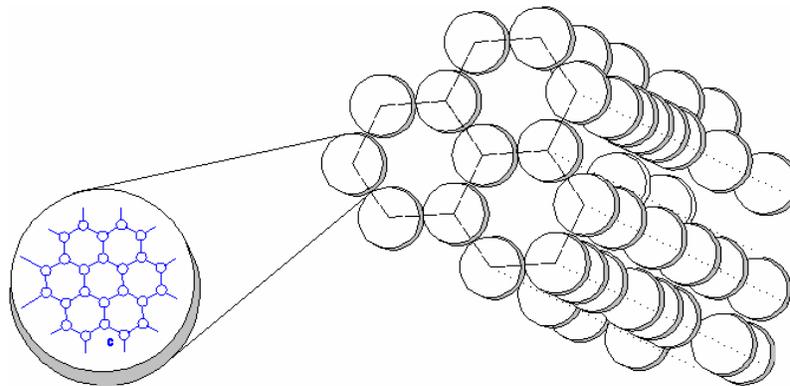


Fig. 1.6 *Cristales Líquidos tipo Discóticos.*



1.4.2 Clasificación de los CL's según el modo de aparición de las propiedades líquido-cristalinas

CRISTALES LÍQUIDOS LIOTRÓPICOS: En éstos las propiedades líquido-cristalinas aparecen cuando una apropiada concentración de materia se disuelve en algún solvente. El sistema liotrópico más común, está formado por agua y moléculas anfifílicas⁶ tales como detergentes, jabones y lípidos. La variable mas importante para controlar ésta fase es la cantidad de solvente (o concentración). Algunas fases poseen estructuras con una, dos o tres dimensiones de orden en su arreglo formando semi-esferas llamadas micelas donde la parte hidrofóbica permanece al centro evitando el contacto con el agua y la hidrofílica queda expuesta libremente al. Éste tipo de CL's son de gran interés en estudios de biología debido a su similitud con la membrana celular y otras estructuras exteriores de las célula [14]. Los liotrópicos se subclasifican en lamelares, hexagonales y cúbicos isotrópicos (Fig. 1.7).

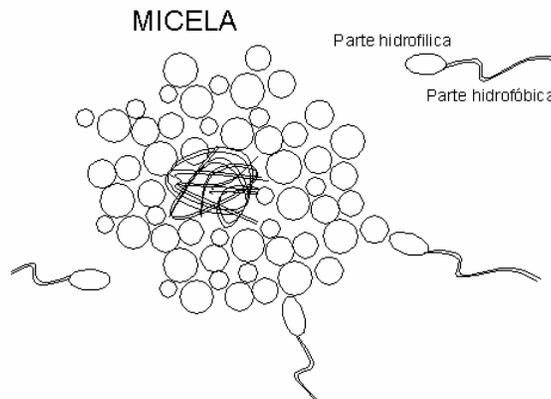


Fig. 1.7 *Cristales Líquidos Liotrópicos.*

CRISTALES LÍQUIDOS POLIMÉRICOS: Son CL's formados por cadenas poliméricas conectadas entre sí. De acuerdo al grado de flexibilidad, los CL's poliméricos se pueden clasificar en tres tipos: CL polimérico tipo vinil (el mas

⁶ Moléculas que presentan gran afinidad con el agua en uno de sus extremos (cabeza hidrofílica) y que son incapaces de mezclarse con el agua en el extremo opuesto (cola hidrofóbica).



flexible), tipo Dupon Kevlar (semi-rígido) y tipo cadena polipéptida que presenta la mayor rigidez. (Fig. 1.8)

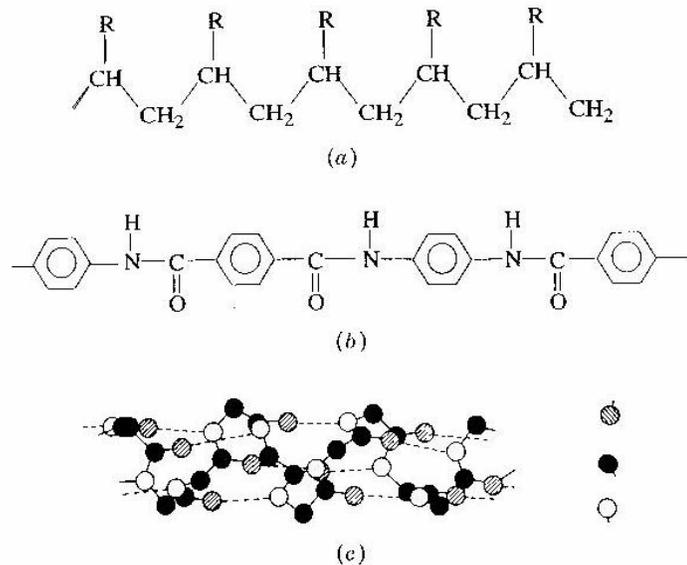


Fig. 1.8 Configuración de los CL's Poliméricos: a) tipo vinil, b) Dupon Kevlar, c) cadena polipéptica.

Existen dos tipos de arreglo en la arquitectura molecular de los CL's poliméricos las cuales son CL's de cadena principal y de cadena lateral. Los primeros se forman de una cadena lineal de monómeros, (cadena principal) cuyas unidades monoméricas son anisotrópicas y permiten la polimerización y generación de mesofases; dichas unidades monoméricas se unen con enlaces formados por cadenas flexibles de hidrocarburos (Fig. 1.6). Los CL's poliméricos de cadena lateral consisten en estructuras monoméricas, (usualmente CL's calamíticos aunque también hay algunos discóticos) unidos a la cadena principal en una especie de nodo polimérico central cuya estructura esta compuesta por unidades de metileno (-CH₂-) o ether (-O-) (Fig. 1.9). En general los CL's poliméricos se caracterizan por una alta viscosidad de monómeros y son útiles en aplicaciones ópticas como en dispositivos de visualización o almacenamiento óptico de información [18].

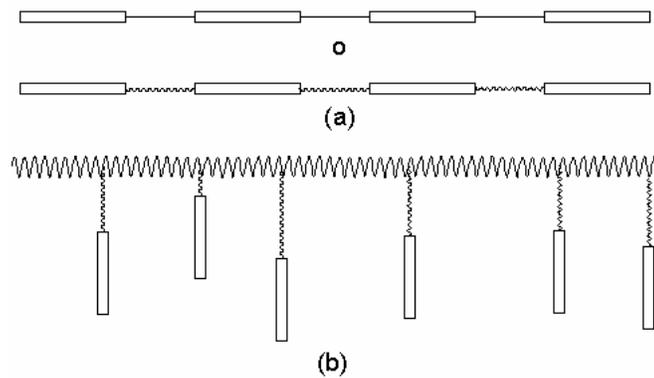


Fig. 1.9 CL's Poliméricos: a) Cadena principal b) Cadena lateral.

CRISTALES LÍQUIDOS TERMOTRÓPICOS: En cuanto a propiedades ópticas lineales y no lineales, estos son los más usados y estudiados. Presentan varias fases en función de la temperatura y se pueden modelar para su estudio como moléculas con geometría de elipsoide (comúnmente conocidas como varas o bastones). Estas moléculas son rígidas e interactúan entre sí formando diversas estructuras ordenadas, las cuales pueden caracterizarse por el grado de orden en la orientación de sus moléculas. Existen tres clases principales de estructuras termotrópicas las cuales son clasificadas por parámetros físicos como el orden orientacional; éstas clases son: nemáticos, colestéricos y esmécticos.

- NEMÁTICOS: en esta fase las moléculas se encuentran colocadas al azar, pero mantienen en promedio una orientación (de su eje longitudinal) en una dirección dada denominada vector director " \hat{n} " el cual es constante en toda la muestra. Esta es la fase más desordenada de cristales líquidos y en ella las moléculas son casi simétricas con respecto a su eje longitudinal. Se mueven caóticamente como en un líquido pero se orientan manteniendo un orden anisotrópico que constituye la principal diferencia entre estos sistemas y un líquido ordinario. El orden de las moléculas nemáticas, depende de factores como la temperatura y la densidad, que determinan el tipo de fase líquido-cristalina que puede formarse. Por ejemplo, cuando el número de moléculas por unidad de volumen es elevado, éstas se encuentran más cerca unas de otras y las interacciones repulsivas entre ellas son



más intensas, lo cual favorece la aparición de orden tanto de orientación como de posición en el CL; sin embargo las fluctuaciones térmicas producen defectos en la orientación, los cuales dan lugar a estructuras microscópicas en forma de hilo que flotan en el nemático y precisamente esta característica fue quien dio origen a su nombre (*nemático*: del griego *nemas* o *nematos* = filiforme o con forma de hilo). (Fig. 1.10)

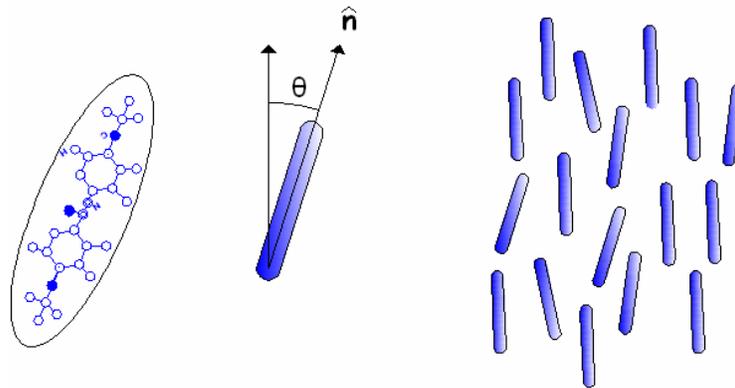


Fig. 1.10 CL's Nemáticos.

- COLESTÉRICOS: Los colestéricos históricamente son llamados así debido a que son los CL's presentes en las moléculas de colesterol, también se conocen como CL's nemáticos quirales. En éstos las propiedades físicas son semejantes a las de los nemáticos excepto en que existe una ligera tendencia a alinearse entre moléculas vecinas, lo cual obliga al director a distribuirse en forma de hélice (Fig. 1.5). Los colestéricos surgen debido a la adición de moléculas quirales (moléculas ópticamente activas) en los cristales líquidos nemáticos. De ésta forma las moléculas tienden a alinearse en una dirección común (como en los nemáticos simples), pero el vector director \hat{n} gira en función de la posición en torno a un eje común (Fig. 1.11).

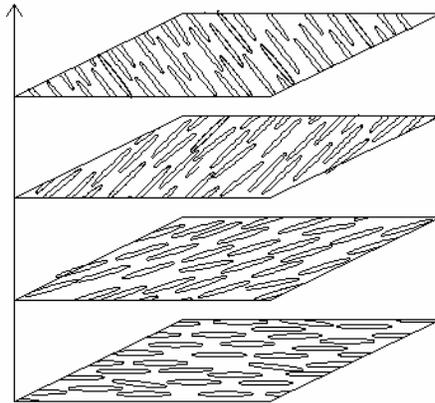


Fig. 1.11 *Arreglo molecular de un CL Colestérico.*

- ESMÉCTICOS: Constituyen la fase más ordenada de los CL's, en esta los centros de masa de las moléculas se agrupan en capas y en cada una de ellas, existe una orientación ordenada de las moléculas. De acuerdo con el arreglo y tipo de acomodo de las mismas, se clasifican en tres tipos: esmécticos tipo A, tipo C y tipo C* o ferroeléctricos.

* Esmécticos tipo A: en estos cada capa de moléculas está posicionada al azar, pero mantienen un orden posicional a lo largo del eje normal al plano de la capa. Sus propiedades ópticas son uniaxiales⁷ y existe una simetría rotacional alrededor de la dirección del eje (Fig. 1.12).

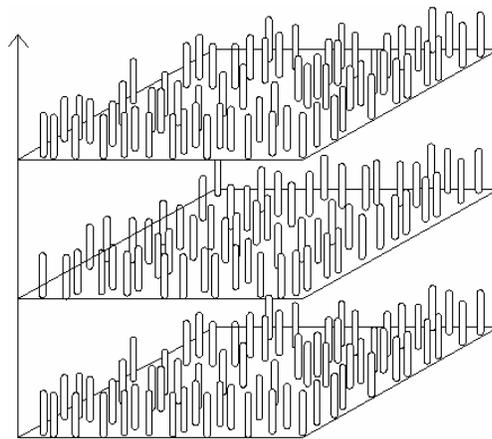


Fig. 1.12 *Arreglo molecular de un CL Esméctico tipo A.*

⁷ Poseen sólo una dirección a lo largo de la cual la luz monocromática (formada por una sola longitud de onda) viaja con la misma velocidad, esta dirección se conoce como eje óptico.



* Esméticos tipo C: Son muy similar a los esméticos tipo A, excepto en que el director y la capa del esmético no son perpendiculares, ya que las moléculas dentro de cada capa están inclinadas con respecto a la normal al plano un cierto ángulo constante, por lo cual presenta propiedades ópticas biaxiales (Fig. 1.13)

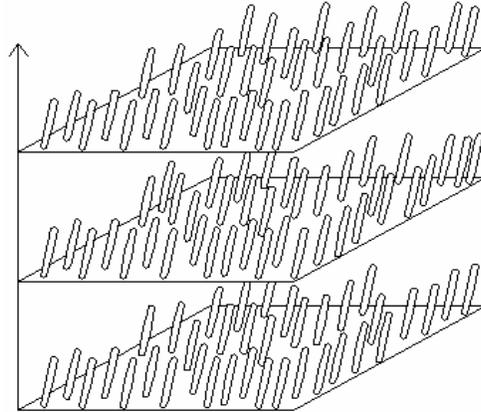


Fig. 1.13 Arreglo molecular de un CL Esmético tipo C

* Esméticos tipo C* (ferroeléctricos): Se caracterizan por que el eje director forma un ángulo de inclinación con respecto a la capa del esmético, el cual no es constante, gira de capa en capa formando una especie de hélice (Fig. 1.14). Los esméticos tipo C* son análogo a los colestéricos y pueden provocar una polarización de la luz⁸ espontánea [18].

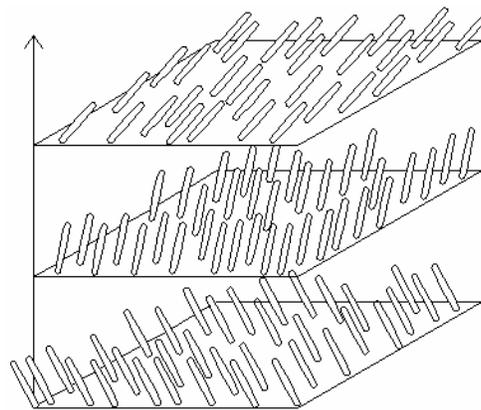


Fig. 1.14 Arreglo molecular de un CL Esmético tipo C*.

⁸ Propiedad de las ondas transversales de la luz (ondas perpendiculares a la dirección de propagación) consistentes en que todas las vibraciones de la onda se producen sobre una sola dirección perpendicular a la de propagación.



1.5 Celda híbrida

Para algunas de las aplicaciones más comunes de los CL's nemáticos donde se puedan controlar sus propiedades físicas, se requiere que éstos se depositen dentro de una especie de celda (usualmente rectangular) formada por un par de paredes de vidrio con una separación que varía de entre 5 y 100 [μm] [19]; aquí las fuerzas de interacción molecular por sí solas no pueden provocar alguna orientación determinada del director así que cada molécula nemática se posiciona aleatoriamente sin guardar algún orden dado. Debido a lo anterior y con el fin de establecer una orientación definida en la celda para que a partir de ella se logre controlar la posición del CL (aplicando efectos externos), se lleva a cabo un tratamiento en las paredes que forman la celda.

Existen diversas maneras de realizar este tratamiento, las cuales se dividen básicamente en dos: las que corresponden a provocar una orientación de las moléculas del nemático en forma paralela a la pared de la celda (alineamiento homogéneo o planar) y, las que provocan una orientación perpendicular a ella (alineamiento homeotrópico o perpendicular) [16].

Para orientar las moléculas nemáticas de forma paralela a las placas de la celda, el tratamiento aplicado consiste en pulir en una sola dirección las placas de vidrio entre las cuales se colocará el nemático; provocando con ello surcos de entre 10 y 100 [nm] de profundidad [19], donde las moléculas del nemático se depositan y se pegan a las paredes por las fuerzas de atracción. De esta forma, un gran número de moléculas de CL quedan pegadas a la superficie de la celda con una orientación exacta y ningún efecto térmico las puede mover de dicha posición. Las sucesivas capas de nemático siguen la orientación de las anteriores, quedando alineadas de forma similar, pero este efecto deja de ocurrir conforme las moléculas se alejan de las paredes.

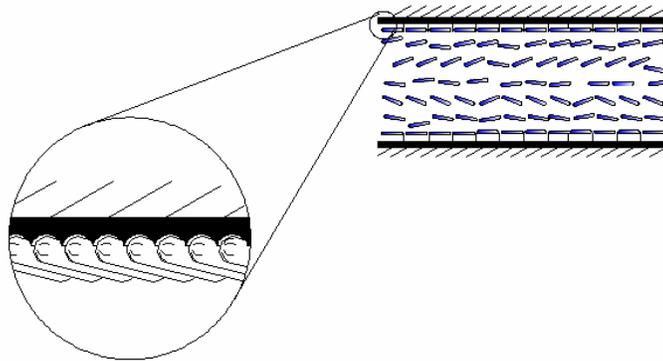


Fig. 1.16 Orientación homogénea o planar de las moléculas de CL nemático.

Por otra parte, para orientar el director del nemático de tal manera que permanezca perpendicular a los paneles de la celda, se lleva a cabo un tratamiento físico, que consiste en inyectar un número muy pequeño de agentes activos superficiales conocidos como *surfactantes* (derivado del inglés surface active agents); los cuales están constituidos por moléculas largas que poseen una forma parecida a renacuajos con dipolo eléctrico constante en un extremo (cabeza) y una cola larga y delgada⁹ (Fig. 1.17). Al añadir estas moléculas, sucede que la superficie del vidrio atrae fuertemente sus dipolos, sobre todo si sobre ellas se hallan cargas eléctricas o gotas de agua muy pequeñas (esto se debe a que las gotas de agua contienen dipolos constantes). Debido a lo anterior, las cabezas de las moléculas que se han inyectado se adhieren a las paredes (de manera perpendicular) y sus colas quedan flotando y con ello obligan a las moléculas nemáticas a formar un ángulo recto con la superficie de la placa que forma la celda (Fig. 1.17).

Al aplicar estos efectos de orientación, se consiguen capas del nemático orientadas según se necesite, pero además las propiedades del CL no se modifican, es decir, sus moléculas pueden fluir como un líquido y presentar a la vez un acomodo regular semejante al de los cristales.

⁹ Ejemplos de soluciones surfactantes son la disolución de lecitina (ácido graso insaturado) en cloroformo al 0.2%.

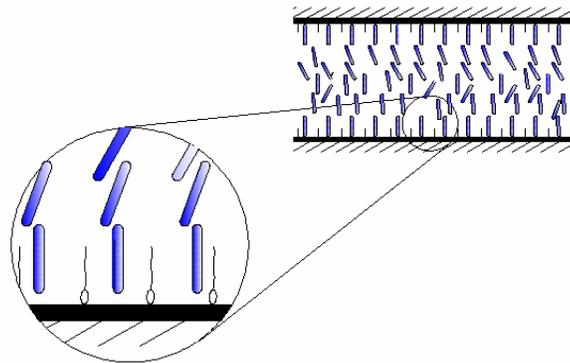


Fig. 1.17 Orientación homeotrópica de las moléculas de CL nemático.

Al tipo de acomodo de celda donde en una cara se induce una alineación homeotrópica y en otra una tipo planar, se conoce como arreglo de celda híbrida (Fig. 1.18) y es uno de los de mayor importancia en aplicaciones tecnológicas con CL's nemáticos debido a que los valores de campo eléctrico requeridos para modificar la orientación de las moléculas de CL son menores que en celdas con orientación solamente planar u homeotrópica.

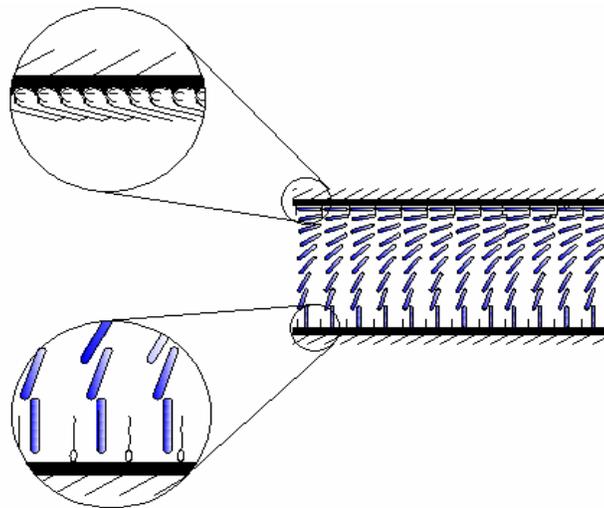


Fig. 1.18 Celda Híbrida con moléculas de CL nemático.

1.6 Fluidos electro-reológicos

Los fluidos electro-reológicos (FER) son líquidos o suspensiones formadas por un medio continuo (generalmente un líquido aislante) y un medio disperso que puede



ser sólido o líquido. En el primer caso son llamadas suspensiones electro-reológicas (o fluidos electro-reológicos coloidales) y en el segundo emulsiones. Cuando se trata de FER coloidales, las partículas sólidas dispersas pueden ser inorgánicas, metálicas, orgánicas o materiales poliméricos semiconductores [4].

Estos fluidos se caracterizan por que sus propiedades reológicas (viscosidad, primera y segunda diferencias normales de esfuerzos, etc.) pueden sufrir cambios reversibles de varios órdenes de magnitud bajo la acción de un campo eléctrico externo, además el tiempo de respuesta de estos cambios puede ser del orden de 10^{-3} [s] [4], propiedad que los hace sumamente atractivos en aplicaciones dentro de sistemas auto controlados y por ello son usados en interfaces eléctricas y mecánicas en varias áreas de la industria.

Los CL's son fluidos electro-reológicos del tipo emulsión y aunque actualmente es mucha la literatura y estudios en torno a estos materiales, aún no se ha logrado la comercialización en masa de equipos, sistemas y aplicaciones industriales que hagan uso del efecto electro-reológico presente en estos materiales, esto debido a dificultades técnicas asociadas al insuficiente entendimiento de los mecanismos responsables de tal efecto.



CAPITULO 2

PROPIEDADES DIELECTRICAS Y ELÁSTICAS EN LOS CL's NEMÁTICOS

Para analizar el comportamiento físico de las moléculas de los CL's se usan varios términos y definiciones aplicables a los materiales sólidos, tales como constantes elásticas, conductividad eléctrica, constantes dieléctricas, etc. En este capítulo se estudiará muy brevemente la aplicación de algunos de estos conceptos a los CL's nemáticos con el fin de facilitar el análisis y comprensión de las ecuaciones que describen el comportamiento físico de los CL's nemáticos, las cuales se expondrán en capítulos posteriores.

2.1 Propiedades elásticas de CL's nemáticos

En un sólido las propiedades elásticas son explicadas por la teoría de la elasticidad, es decir, si aplicamos un esfuerzo sobre un sólido, en respuesta este se deformará. Esta deformación provoca una perturbación en el orden del arreglo de las moléculas y conduce a un incremento en la energía del sólido, la cual es proporcional al cuadrado de la magnitud de la deformación (Ley de Hooke) [20] y si el esfuerzo deja de aplicarse (y no se ha sobrepasado el límite de cedencia del material), el sólido se relajará y regresará a su forma original. Este comportamiento elástico contrasta con el de un fluido el cual no muestra rigidez, ya que al aplicarle el más mínimo esfuerzo cortante, este fluye.

En un CL si se aplica un esfuerzo que perturbe cualquier orden que posean las moléculas del sistema, se dará una deformación del cristal y por ende un incremento de la energía elástica. Si se aplica un esfuerzo que guíe a una deformación y que no



perturbe el orden del arreglo de las moléculas, se provocará que en el CL no se incremente la energía elástica y en respuesta, el material fluirá.

La esencia del comportamiento mecánico de los CL's es que éstos responden como sólidos para algunos tipos de deformación y como líquido para otras. Por ejemplo, los CL's nemáticos fluyen como un líquido en respuesta a un esfuerzo cortante en la dirección de los ejes longitudinales de las "varas" que forman el cristal ya que la deformación resultante no altera el orden orientacional; sin embargo, si se aplica un esfuerzo en la dirección del eje mas corto de las moléculas del nemático, sí se provocará una alteración en el orden orientacional que inducirá un incremento de su energía elástica debido a que las moléculas de CL no fluirán como lo haría un líquido sino que se deformarán elásticamente [16].

En nemáticos son tres los tipos de deformaciones posibles que incrementan la energía elástica: torsión (Twist), apertura (Splay) y pandeamiento (Bend) (Fig. 2.1). Debido a que las dimensiones de las moléculas oscilan entre 20 y 25 \AA , la microestructura asociada a la naturaleza atómica de la materia puede ser ignorada y en consecuencia es posible estudiar las deformaciones del director bajo la "Teoría del Continuo" que permite obtener una expresión para la configuración de cada uno de los tipos de deformación.

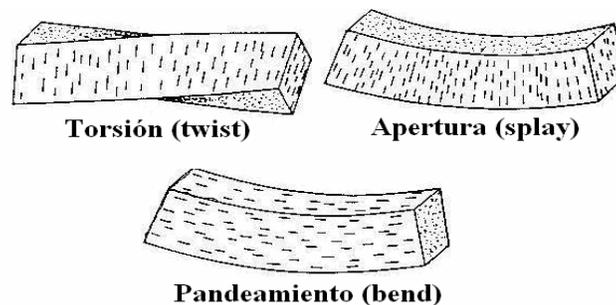


Fig. 2.1 Deformaciones que incrementan la Energía elástica en CL's nemáticos.

En analogía con un cambio en la longitud de un resorte (ley de Hooke), es posible expresar la energía elástica, que surge al deformar una molécula de CL en términos de constantes elásticas, pero esta situación (en un CL) es matemáticamente más compleja ya que existen tres componentes del director en tres direcciones del espacio por lo que el número de términos aumenta significativamente. Debido a lo anterior, es necesario describir el espacio desplazado en forma de un tensor de segundo orden, en el cual se puede simplificar el número de términos explorando las propiedades de simetría del sistema. De esta forma es posible obtener al final solamente tres constantes elásticas independientes logrando con ello tener una expresión de la energía libre (o energía de distorsión) por unidad de volumen de un CL nemático, ec. (2.1).

$$F_e = \frac{1}{2} K_1 (\nabla \cdot \hat{n})^2 + \frac{1}{2} K_2 (\hat{n} \cdot (\nabla \times \hat{n}))^2 + \frac{1}{2} K_3 ((\hat{n} \cdot \nabla) \cdot \hat{n})^2. \quad (2.1)$$

Esta expresión es conocida como la densidad de energía libre de Frank y, en ella K_1 , K_2 y K_3 son constantes elásticas (análogas a las constantes de un resorte) que se relacionan con los tres tipos de deformaciones posibles en los CL's: apertura, torsión y pandeamiento respectivamente. Los valores típicos de estas constantes oscilan en un rango de magnitud de $(1 \times 10^{-11} \text{ [N]})$ y decrecen conforme aumenta la temperatura¹⁰ [14,16].

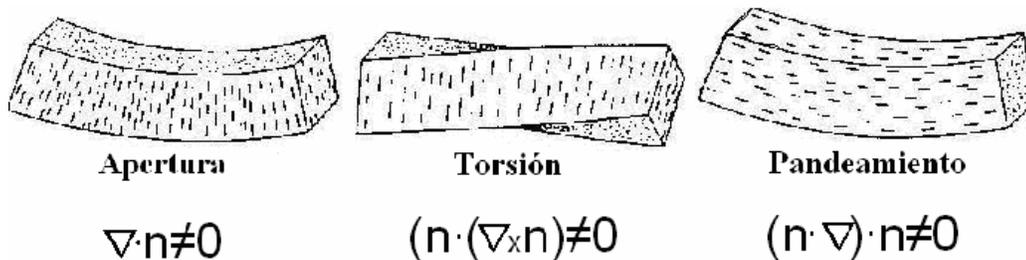


Fig. 2.2 Relación entre la ecuación de densidad de energía libre de Frank, con los tipos de deformaciones principales en cristales líquidos nemáticos.

¹⁰ La densidad de energía libre, además de ser afectada por las constantes elásticas, puede ser influida por otras variables como los campos magnéticos, eléctricos, temperatura, entre otras.



Con objeto de simplificar el manejo de las ecuaciones y tomando en cuenta que las constantes elásticas tienen un orden de magnitud similar; se suele simplificar la expresión (2.1) considerando que $K_1 = K_2 = K_3 = K$ con lo cual resulta

$$F_e = \frac{1}{2} K [(\nabla \cdot \hat{n})^2 + (\nabla \times \hat{n})^2]. \quad (2.2)$$

2.2 Propiedades dieléctricas y campos eléctricos en CL's nemáticos

Las constantes dieléctricas y los índices de refracción además de la conductividad eléctrica de los CL's, son parámetros físicos muy sensibles a la aplicación de campos eléctricos y magnéticos. El nivel de energía interna de las moléculas nemáticas depende de manera importante de la dirección y frecuencia de dichos campos.

Las moléculas que forman la fase nemática presentan un dipolo permanente¹¹ (Fig. 2.3), en ausencia de un campo es igual la probabilidad de que los puntos del dipolo apunten en cualquier dirección, sin embargo, cuando una fase nemática es expuesta a los efectos de un campo eléctrico \vec{E} , este induce una polarización P que orienta los directores del nemático en una dirección dada. Esta polarización P se expresa en un sistema isotrópico por [16]:

$$\vec{P} = (\varepsilon - 1)\varepsilon_0 \vec{E}. \quad (2.3)$$

donde ε es la constante dieléctrica y ε_0 es la permitividad dieléctrica en el vacío.

¹¹ Configuración de dos cargas puntuales donde la carga positiva neta queda separada una cierta distancia de una carga negativa de igual magnitud.

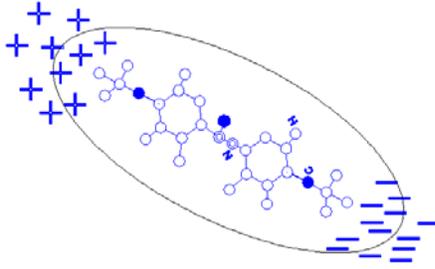


Fig. 2.3 Dipolo eléctrico permanente en una molécula de CL nemático.

En los CL's nemáticos, el grado con el que el material puede ser polarizado depende de la cantidad de campo que es aplicado paralela o perpendicularmente al vector director. Para un campo aplicado en alguna dirección, la energía por unidad de volumen que provoca la polarización de la molécula de CL (en sistema CGS) se describe como [16]:

$$f_{el} = \frac{1}{4\pi} \vec{D} \cdot \vec{E}, \quad (2.4)$$

donde D_i es el vector desplazamiento eléctrico que se conforma de la constante de anisotropía dieléctrica ε_a y del campo eléctrico \vec{E} aplicado:

$$D_i = \varepsilon_{ij} E_j, \quad (2.5)$$

donde

$$\varepsilon_{ij} = \varepsilon_{\perp} \delta_{ij} + \varepsilon_a \eta_i \eta_j, \quad (2.6)$$

$$\varepsilon_a = \varepsilon_{\parallel} - \varepsilon_{\perp}, \quad (2.7)$$

ε_{\parallel} , y ε_{\perp} son las constantes dieléctricas paralela y perpendicular al vector director \hat{n} .

Así, la densidad de energía asociada al campo eléctrico se puede escribir de la siguiente manera:

$$f_{el} = -\frac{1}{4\pi} \int D dE = -\frac{\varepsilon_{\perp}}{8\pi} E^2 - \frac{\varepsilon_{\parallel}}{8\pi} (\hat{n} \cdot E)^2. \quad (2.8)$$

En CL's, los valores típicos de ε_{\parallel} y ε_{\perp} son del orden de $5\varepsilon_0$ [14], cuando $\varepsilon_{\parallel} > \varepsilon_{\perp}$, se dice que el CL posee una anisotropía dieléctrica positiva mientras que cuando $\varepsilon_{\parallel} < \varepsilon_{\perp}$ se tiene una anisotropía dieléctrica negativa.



CAPITULO 3

ESTUDIO DE MECÁNICA DE FLUIDOS

El movimiento de las moléculas en los CL's nemáticos da como resultado una interesante e inusual variación de sus propiedades físicas. Para conocer el origen de estos efectos se requieren entender las leyes físicas que rigen el movimiento molecular de dicho material. En este capítulo se estudiarán primero las bases necesarias para comprender la reología de los CL's nemáticos, iniciando por la descripción de la viscosidad, el tensor de esfuerzos y la primera diferencia normal de esfuerzos; una vez hecho esto, se explicará muy brevemente el desarrollo de las ecuaciones que gobiernan la dinámica de los CL's nemáticos considerándolos como un medio continuo (Nematodinámica) y se expondrá la interpretación física de dichas ecuaciones. Finalmente se estudiarán los coeficientes de Miesowicz y se explicará la naturaleza de su significado.

3.1 Viscosidad dinámica

La viscosidad es una propiedad de los fluidos que se opone a que estos fluyan cuando se les aplica un esfuerzo cortante. Si un fluido se somete (en un plano) a un esfuerzo de corte " τ " como se indica en la Fig. 3.1; el ángulo de deformación $\delta\theta$ aumentará continuamente con el tiempo mientras siga actuando el esfuerzo τ , es decir:

$$\tau \propto \frac{d\theta}{dt} = \dot{\gamma}. \quad (3.1)$$

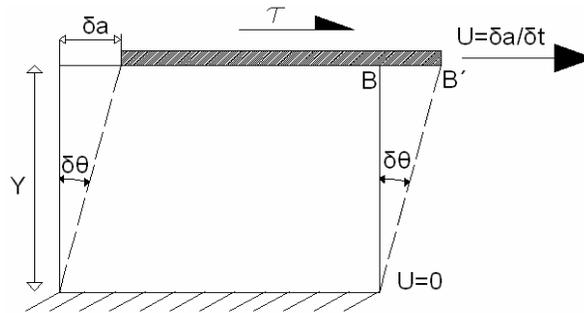


Fig. 3.1 En fluidos un esfuerzo cortante produce una deformación a una razón $\delta\theta/\delta t$.

Para un pequeño incremento de tiempo δt , el incremento del ángulo $\delta\theta$ resulta ser:

$$\tan(\delta\theta) \approx \delta\theta = \frac{\delta a}{Y} = \frac{U\delta t}{Y}. \quad (3.2)$$

Por otra parte, en el caso límite de variaciones infinitesimales la razón de deformación es:

$$\dot{\gamma} = \lim_{\delta t \rightarrow 0} \frac{\delta\theta}{\delta t} = \frac{U}{Y} = \frac{du}{dy}. \quad (3.3)$$

Si se incrementa el valor del esfuerzo cortante aplicado, la razón de deformación en el fluido también aumenta en igual proporción; entonces se tiene que el esfuerzo cortante aplicado es proporcional a la rapidez de deformación ($\tau \propto \dot{\gamma}$). De las ecs. (3.1) y (3.3) se tiene:

$$\begin{aligned} \tau &\propto \frac{du}{dy}, \\ \tau &= \eta \frac{du}{dy}. \end{aligned} \quad (3.4)$$

La constante de proporcionalidad η , resulta ser el coeficiente de viscosidad también conocido como viscosidad absoluta o dinámica [21,22]. En general, la viscosidad en líquidos aumenta muy débilmente con la presión, pero es afectada fuertemente por la variación de la temperatura; además cuando es dividida sobre la densidad del fluido, se conoce como viscosidad cinemática [23].

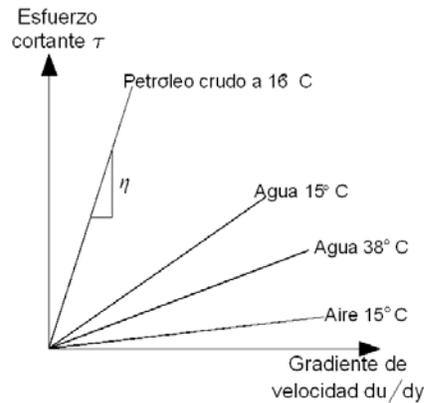


Fig. 3.2 Variación lineal del esfuerzo cortante vs el gradiente de velocidad en diferentes sustancias.

3.2 Fluidos Newtonianos y no Newtonianos

Los fluidos Newtonianos son aquellos en donde al aplicar un esfuerzo cortante, éste se comporta de manera directamente proporcional al gradiente de velocidad y en consecuencia la viscosidad es constante e independiente del valor del esfuerzo aplicado y del tiempo de aplicación del mismo (cumplen con la ecuación (3.4)); ejemplos de fluidos Newtonianos son el agua o el aceite de oliva.

En fluidos no Newtonianos, el esfuerzo cortante aplicado no es directamente proporcional a la rapidez de deformación y por ello varía con el gradiente de tensión que se le aplica; como resultado, un fluido no Newtoniano no tiene un valor de viscosidad definido y constante. Ejemplos de este tipo de fluidos son la mayonesa y la sangre. Como se comprobará mas adelante, los CL's se comportan como fluidos no Newtonianos.

3.3 Viscosidad aparente

En los fluidos no Newtonianos la viscosidad depende del valor del esfuerzo cortante aplicado; en estos fluidos, a la pendiente que resulta del cociente del esfuerzo



cortante y la velocidad de deformación en cada condición de temperatura, esfuerzo aplicado y presión dada, se le denomina viscosidad aparente η_{ap} (Fig. 3.3). En fluidos Newtonianos, la viscosidad aparente es igual que la viscosidad dinámica ya que esta es independiente de la variación del esfuerzo aplicado y de las condiciones del sistema [21].

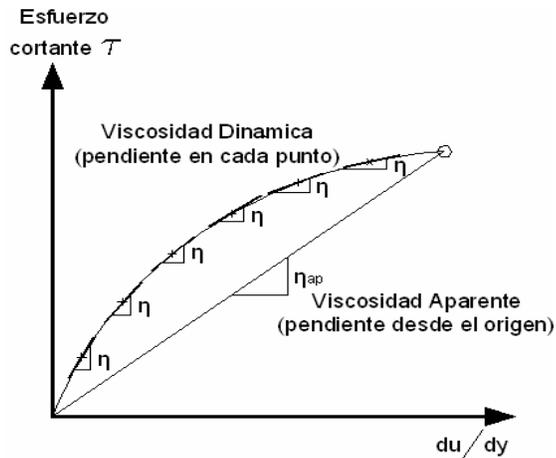


Fig. 3.3 Diferencia entre viscosidad dinámica " η " y aparente " η_{ap} " en fluidos no Newtonianos.

3.4 Fluidos dilatantes y pseudoplásticos (Fenómenos "Shear thinning" y "Shear thickening")

En los fluidos no Newtonianos, para cualquier condición dada de temperatura y presión se presentan dos fenómenos que implican un cambio en la viscosidad del fluido: el primero consiste en el cambio en la viscosidad como función de la magnitud del esfuerzo cortante aplicado (fluidos pseudoplásticos y *dilatantes*) y el segundo consiste en el cambio en la viscosidad como función del tiempo de aplicación del esfuerzo (fluidos *reopécticos* y *tixotrópicos*). Un fluido dilatante es aquel que se caracteriza por que su viscosidad aumenta al aumentar el esfuerzo cortante aplicado, es decir ocurre el efecto denominado adelgazamiento del cortante o "*shear thickening*" (la viscosidad aparente se incrementa cuando aumenta el



esfuerzo cortante aplicado). Son ejemplos de estas sustancias las soluciones concentradas de azúcar en agua (almíbar) y la arena mojada [21].

Por el contrario en los fluidos pseudoplásticos, la resistencia a la deformación disminuye si el esfuerzo aumenta, efecto conocido como engruesamiento del cortante o “*shear thinning*” (la viscosidad aparente decrece conforme se incrementa el esfuerzo cortante aplicado). La gelatina, salsa de tomate (*ketchup*) y la mostaza son ejemplos de esta categoría. Si el efecto es muy importante como en el caso marcado de la Fig. 3.4-a, el fluido se denomina “plástico”. El caso límite de las sustancias plásticas son los denominados plásticos ideales o plástico de Bingham en los cuales existe una relación lineal entre el esfuerzo cortante y el gradiente de deformación una vez que se ha superado un determinado valor del esfuerzo cortante (esfuerzo umbral) [21]; ejemplos de fluidos plásticos son la pasta de dientes, que no fluye al exterior hasta que por apretar el tubo se sobrepasa un cierto esfuerzo crítico [22,23].

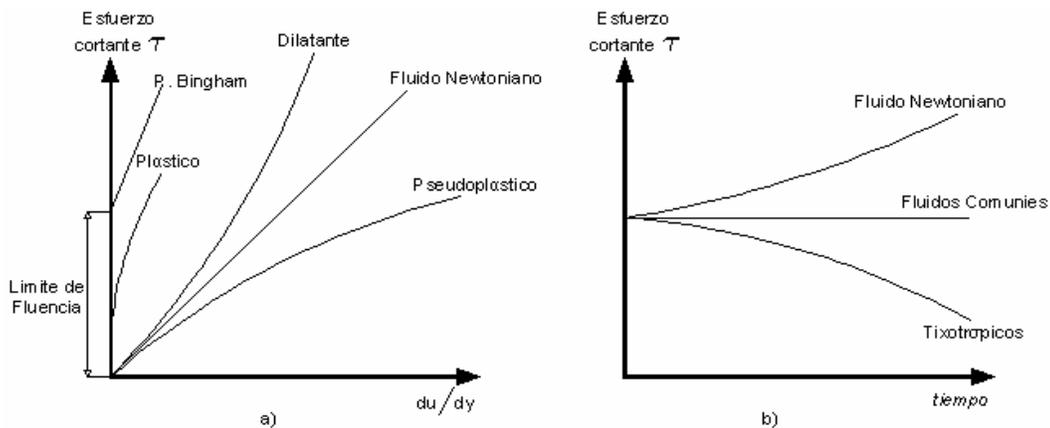


Fig. 3.4 Viscosidad a) esfuerzo en función de la velocidad de deformación; b) efecto del tiempo sobre los esfuerzos aplicados.

Si la viscosidad aparente cambia de acuerdo con el tiempo durante el cual se aplican las fuerzas de corte, surgen tipos adicionales de comportamiento no Newtoniano. Los líquidos para los cuales la viscosidad aparente aumenta de



acuerdo con la duración del esfuerzo (como en el caso del yeso), se denominan *reopécticos* (Fig. 3.4-b); aquellos para los cuales la viscosidad aparente disminuye con la duración del esfuerzo (como en el yogurt y las tintas de impresión) se denomina *tixotrópicos* [24].

3.5 Tensor de esfuerzos

Las fuerzas que actúan sobre un elemento de materia pueden ser de dos tipos: las que surgen del seno del material y son proporcionales a la masa de la sustancia (gravedad, fuerza electromagnética, fuerza centrífuga, etc.), las cuales se conocen como “fuerzas de cuerpo” y se miden en unidades de fuerza por unidad de volumen y, las que actúan sobre la superficie del elemento de materia que se miden en unidades de fuerza por unidad de superficie y se conocen como “fuerzas de superficie” o esfuerzos [26]. A través de un punto puede haber un infinito número de esfuerzos que no pueden ser representados matemáticamente por un vector, es por ello que surge el “Tensor de Esfuerzos”, el cual es una representación matricial de los esfuerzos aplicados sobre un elemento de materia y con él, con sólo conocer tres del infinito número de esfuerzos, es posible calcular todos los demás [25].

Para encontrar una expresión que describa los esfuerzos en el interior de un fluido considérese una porción continua de fluido sometida a la acción de diversas fuerzas

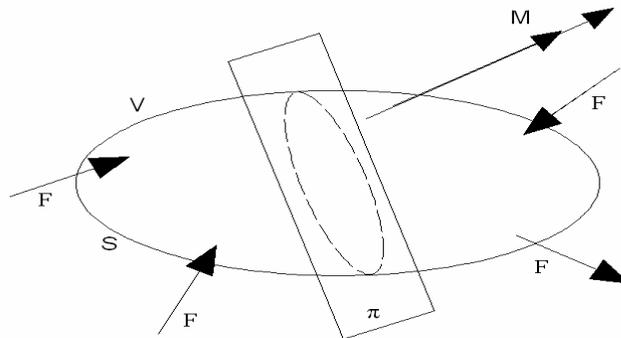


Fig. 3.5 Porción continua de fluido sometida a la acción de diversas fuerzas y momentos externos.



y momentos externos, además supóngase que un plano π intercepta el medio fluido continuo, como se muestra en la Fig. 3.5.

Si se retira la porción derecha del fluido, sobre la superficie plana obtenida se aprecia la transmisión de fuerzas que ejercía la materia que ya no está presente. Para observar con mayor detalle las fuerzas que se transmiten en forma distribuida sobre esa superficie se traza una malla sobre el plano arbitrario π .

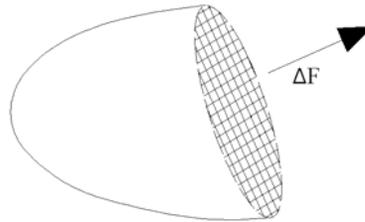


Fig. 3.6 Porción continua de fluido donde cada elemento de área ΔA trasmite una fuerza ΔF .

Cada elemento de área ΔA transmite una fuerza ΔF que a su vez tiene dirección en el espacio y puede expresarse en sus componentes normal (ΔF_N) y tangencial (ΔF_T) a la superficie ΔA . En estas condiciones se define el esfuerzo normal (σ) como el límite de la relación ($\Delta F_N/\Delta A$) cuando ΔA tiende a cero y el esfuerzo cortante (τ) como el límite de la relación ($\Delta F_T/\Delta A$) cuando ΔA tiende a cero.

Si se trazaran seis planos alrededor de tal punto de manera que se defina un elemento infinitesimal de volumen " dV ", con aristas dx , dy , dz ; se tiene que sobre cada cara del elemento infinitesimal podrá definirse un esfuerzo normal y una pareja de esfuerzos cortantes obtenidos de la descomposición de la fuerza que se transmite por esa cara. En total son 9 las componentes de esfuerzo que actúan en dicho volumen (Fig. 3.7). El primer subíndice de cada componente de esfuerzo denota la cara en la que actúa dicha componente y el segundo indica la dirección en la que lo hace. Así, las componentes σ_{xx} , σ_{yy} , y σ_{zz} son esfuerzos normales mientras que las componentes τ_{xy} , τ_{xz} , τ_{yz} , τ_{yx} , τ_{zx} , y τ_{zy} representan esfuerzos cortantes.

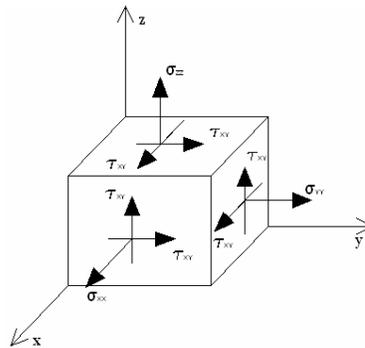


Fig. 3.7 Componentes del esfuerzo en coordenadas rectangulares tridimensionales

Este conjunto de esfuerzos se pueden representar matricialmente y se conoce como tensor de esfuerzos o tensor de esfuerzos de Cauchy “T”; con él, con sólo conocer en algún punto P los esfuerzos relativos a las direcciones coordenadas, es posible calcular los esfuerzos en cualquier otra dirección [25].

$$T = \begin{bmatrix} \sigma_{xx} & \tau_{xy} & \tau_{xz} \\ \tau_{yx} & \sigma_{yy} & \tau_{yz} \\ \tau_{zx} & \tau_{zy} & \sigma_{zz} \end{bmatrix}$$

Aplicando condiciones de equilibrio mecánico, puede demostrarse que los esfuerzos cortantes que actúan sobre planos perpendiculares son de igual magnitud, y con ello se cumplen las siguientes relaciones [26]:

$$\tau_{xy} = \tau_{yx}, \quad \tau_{xz} = \tau_{zx}, \quad \tau_{yz} = \tau_{zy} \quad (3.5)$$

3.6 Primera diferencia normal de esfuerzos

Un fluido bajo la presencia de un esfuerzo cortante se deforma indefinidamente, el tensor de esfuerzos en este caso se forma por una componente estática ($p\delta$) más una componente viscosa (τ), es decir:

$$T = -p\delta + \tau . \quad (3.6)$$



$$T = \begin{bmatrix} -p + \tau_{11} & \tau_{12} & \tau_{13} \\ \tau_{21} & -p + \tau_{22} & \tau_{23} \\ \tau_{31} & \tau_{32} & -p + \tau_{33} \end{bmatrix}$$

donde δ es un tensor isotrópico unitario y p es la magnitud del esfuerzo normal de compresión (conocido como presión hidrostática¹²). Un fluido incompresible sólo es afectado por la adición del tensor isotrópico y en consecuencia el tensor de esfuerzos del fluido T depende también solamente de dicho tensor isotrópico.

En los gases ideales la componente viscosa τ_{ij} del tensor de esfuerzos se puede calcular despejándola de la ec. (3.6), esto es $\tau_{ij} = T_{ij} + p\delta_{ij}$, donde la presión hidrostática se puede calcular a partir de la Ecuación de Estado de Gas Ideal estableciendo la temperatura y densidad de dicho gas. Sin embargo en fluidos incompresibles no Newtonianos, las componentes τ_{ij} y p no son cantidades medibles por separado.¹³

Ya que no es posible conocer las componentes viscosas del tensor de esfuerzos, se recurre a las diferencias normales de esfuerzos, las cuales son medibles directamente [27].

$$N_1 = \sigma_{xx} - \sigma_{zz} \quad (3.7)$$

$$N_2 = \sigma_{yy} - \sigma_{zz} \quad (3.8)$$

Así, en vez de conocer los esfuerzos normales, se usan las diferencias de esfuerzos normales para determinar la presión en los fluidos no Newtonianos no compresibles.

¹² En la convención usada para este trabajo, una presión “ p ” es equivalente a un esfuerzo negativo.

¹³ En fluidos Newtonianos no se presenta este problema ya que las componentes τ_{11} , τ_{22} y τ_{33} son cero.



3.7 Teoría del continuo en CL's nemáticos (Nematodinámica)

Los fundamentos del modelo continuo en los CL's nemáticos fueron desarrollados en los años 20's por Carl W. Oseen (1879-1944) y Hans Zöcher (1893-1974), quienes formularon una teoría estática de los nemáticos que permaneció intacta por casi tres décadas hasta que V. Frederick (1905-2001) reexaminó el tratamiento de Oseen y presentó una teoría también estática, pero considerando las propiedades elásticas de los CL's nemáticos. Las teorías dinámicas fueron formuladas por Adolf Anzelius (1894-1979) y Oseen pero las ecuaciones constitutivas y leyes de conservación que describen de forma global el comportamiento dinámico del estado nemático fueron desarrolladas por J. L. Ericksen (1925 - //) y completadas mas tarde por O. Parodi (1893-1974) y Frank Leslie (1935–2000) y son conocidas como la “Teoría Ericksen-Leslie-Parodi” (ELP) [28, 33].

Esta deducción de las ecuaciones hidrodinámicas para CL's nemáticos está basada en leyes de la mecánica clásica y de la teoría del continuo; consiste básicamente en definir cinco ecuaciones constitutivas (masa, energía y momentum en sus tres componentes) y sus respectivas leyes de conservación por unidad de volumen; aquí las perturbaciones termodinámicas del fluido se consideran despreciables debido a que se trata de un estado en equilibrio local, además se considera que las fuerzas de cuerpo en el sistema son muy débiles por lo cual la interacción molecular del vector director está dada únicamente por la alineación espontánea de las moléculas vecinas. A partir de las ecuaciones constitutivas se calcula la producción de entropía para un fluido isotrópico y con ella se deduce la forma del tensor de esfuerzo viscoso que describe el comportamiento del flujo en los CL's nemáticos, el cual tiene la forma de la ec. (3.9) [28,29].

$$\sigma_{ij} = \alpha_1 n_i n_j V_{kp} n_k n_p + \alpha_2 n_j N_i + \alpha_3 n_i N_j + \alpha_4 V_{ij} + \alpha_5 n_j V_{ik} n_k + \alpha_6 n_i V_{jk} n_k. \quad (3.9)$$



Donde N describe la variación de rotación relativa del director con respecto al flujo y es conocido como el tensor de flujo co-rotacional del director [29].

$$N_i = \dot{n} - W, \quad (3.10)$$

$$W = \frac{1}{2}(v_{i,j} - v_{j,i}), \quad (3.11)$$

donde W es el tensor de vorticidad (también conocido como tensor rotación de flujo); \dot{n} es la velocidad del director ($\dot{n} = w \times \hat{n}$), w es la velocidad angular de la molécula y v_i son los desplazamientos del director. Por otra parte, V_{ij} es el tensor de deformación, el cual se define como¹⁴.

$$V_{ij} = \frac{1}{2}(v_{i,j} + v_{j,i}). \quad (3.12)$$

Los seis coeficientes α_i se conocen como coeficientes de viscosidad de Leslie, y representan la viscosidad del CL en diferentes direcciones¹⁵, sus dimensiones son $[\text{kg} \cdot \text{m}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}]$ en SI y [Poise] en CGS. De estos sólo cinco son linealmente independientes y se relacionan con la ecuación desarrollada por O. Parodi en 1931 [28, 31].

$$\alpha_2 + \alpha_3 = \alpha_6 - \alpha_5. \quad (3.13)$$

De este modo se tienen cinco coeficientes de viscosidad independientes, los cuales se pueden relacionar con las cinco medidas experimentales de viscosidad.

3.8 Coeficientes de Miesowicz

Si en un fluido Newtoniano se aplica un esfuerzo cortante, el gradiente de velocidad es proporcional a dicho esfuerzo, esta constante de proporcionalidad (viscosidad) es

¹⁴ Recordando que en notación tensorial la “coma” denota una derivada parcial con respecto a una coordenada espacial.

¹⁵ Recordar que los CL son anisotrópicos y por ello sus propiedades dependen de la dirección en que se midan.

siempre la misma sin importar la dirección del flujo ni la del esfuerzo aplicado, es decir, se cumple con la ec. (3.4).

$$\tau = \eta \frac{du}{dy} . \quad (3.4)$$

En 1936 Miesowicz demostró que en los CL's nemáticos existen diferentes valores para la constante de viscosidad, los cuales dependen de la orientación del director y la dirección en que se mueve el flujo del CL. Esta anisotropía de las propiedades viscosas en CL's puede ilustrarse al medir la viscosidad para diferentes orientaciones del director con respecto a la dirección en la que fluye el CL.

A dichos valores de las constantes de viscosidad efectiva se les conocen como geometrías de Miesowicz y se expresan en términos de los coeficientes de Leslie (α_i) como [28]:

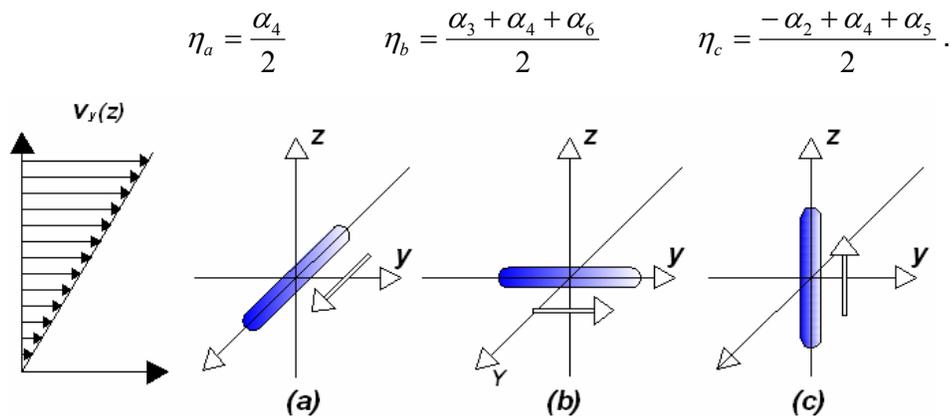


Fig. 3.8 Geometrías de Miesowicz.



CAPITULO 4

EFFECTO ELECTRO-REOLÓGICO Y COMPORTAMIENTO NO NEWTONIANO DE UN CL NEMÁTICO DENTRO DE UNA CELDA HÍBRIDA

Los fenómenos de reorientación del director bajo la acción de efectos externos como campos eléctricos, fueron observados y estudiados por vez primera en la extinta URSS por el científico soviético V. K. Frederick a principios del siglo XX, dichos fenómenos son la base de interesantes propiedades ópticas descritas, algunas de ellas, en capítulos anteriores. Aunque en los últimos años han sido significativos los estudios desarrollados en cuanto al cambio de propiedades físicas en los CL's producto de los fenómenos de reorientación del director [1, 6, 7, 30], aun se desconoce la relación exacta entre el comportamiento de las moléculas en estos materiales y la aplicación simultánea de más de un efecto externo a la vez.

En este capítulo, se desarrollarán las ecuaciones que describen el comportamiento de un CL nemático dentro de una celda híbrida bajo la influencia conjunta de un flujo de corte y un campo eléctrico perpendicular a la celda, se describirá la expresión que modela el perfil de velocidades y la orientación del nemático dentro de la celda y se expondrá la metodología para resolver de forma numérica dichas ecuaciones. Posteriormente se analizarán los resultados arrojados (a partir de la resolución de las ecuaciones antes descritas) para diferentes valores de campo y flujo aplicados. Finalmente se estudiarán los efectos que se derivan de esta reorientación tales como el cambio de la viscosidad del CL a lo ancho de la celda, la primera diferencia normal de esfuerzos y la fuerza entre las placas de la celda, exponiendo en cada caso la interpretación física respectiva.



4.1 Modelo de celda híbrida

Considérese un CL nemático, confinado dentro de una celda híbrida con una alineación homeotrópica¹ en la parte inferior de la celda y una planar² en la superior. Además considérese que el CL se encuentra en equilibrio térmico a temperatura ambiente y que las moléculas del mismo están en estado estacionario; debido a esta configuración las moléculas del CL, sin aplicar excitaciones externas, tendrían una orientación que variaría uniformemente de vertical a horizontal conforme éstas se acercan a la parte superior de la celda (Fig. 4.1).

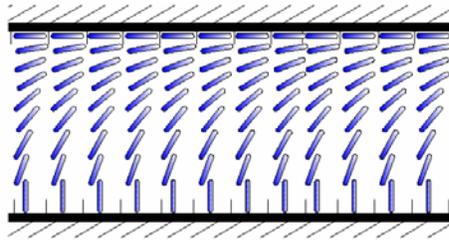


Fig. 4.1 Disposición del CL nemático dentro de la celda híbrida sin campo eléctrico y sin flujo.

Para analizar la orientación de las moléculas del CL en cada punto dentro de la celda, se establece un sistema de referencia cuyo origen coincide con el centro de la misma y en donde el eje “z” es perpendicular a las placas que forman las paredes de la celda y el eje “x” es paralelo a ellas (Fig. 4.2); adicionalmente para hacer el análisis se considerará que la celda tiene un espesor l , un ancho L y que las dimensiones son tales que $L \gg l$. Para determinar la magnitud exacta de inclinación de las moléculas nemáticas en el sistema, se designa un ángulo $\theta(z)$ formado entre el eje z y el vector director \hat{n} y debido a que $L \gg l$, es razonable suponer que la orientación del director ocurre solamente en el plano x - z , como se muestra en la Fig. 4.2; por lo que las coordenadas del director son $\hat{n} = (\sin \theta(z), 0, \cos \theta(z))$ y dependen únicamente de la componente z de la molécula nemática, es decir, es la

¹ Molécula orientada de forma perpendicular a la superficie de la celda.

² Molécula orientada de forma paralela a la superficie de la celda.



orientación o grado de inclinación que tiene la molécula de CL a diferentes alturas z dentro de la celda.

Por otra parte, en la dirección perpendicular a las placas planas que conforman la celda se aplica un campo eléctrico \vec{E} y se ejerce un flujo de corte en el plano x - z a lo largo de la dirección x (Fig. 4.2), por lo que las componentes del campo de velocidad son $v=(v_x(z), 0, 0)$. Las condiciones de frontera para la velocidad, están dadas por la consideración de la existencia de un anclaje fuerte de las moléculas con las paredes de la celda, esto es $v_x(z=\pm l/2)=\pm v_0$. Estos dos efectos generan un par de fuerzas en las moléculas del CL que propician la reorientación del ángulo $\theta(z)$. Las ecuaciones que gobiernan los momentos ejercidos por cada efecto externo se describen a continuación.

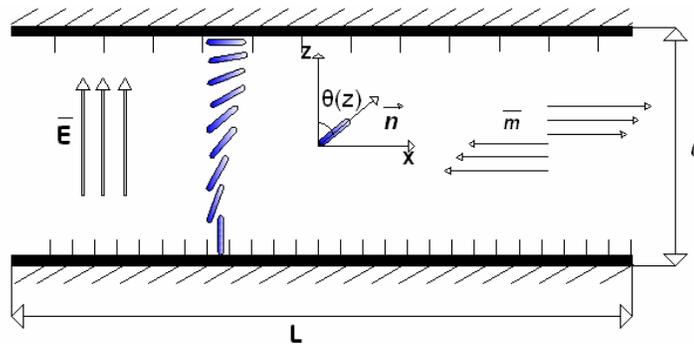


Fig. 4.2 Aplicación del campo eléctrico y flujo cortante dentro de la celda híbrida con CL nemático.

4.1.1 Par en las moléculas del CL nemático inducido por un flujo cortante

Como ya se ha mencionado, dentro de la celda se aplica un flujo cortante sobre el CL a lo largo de la dirección x , debido a él y a la geometría alargada de las moléculas del CL se presenta un momento que les provoca un giro; este efecto se presenta en casi todo el espesor de la celda con excepción de las capas dispuestas cerca de las paredes en donde las moléculas permanecen pegadas a ellas sin



modificar su posición debido al tratamiento físico (descrito en el Cap. I) efectuado en las paredes de la celda. Con base en la teoría nematodinámica Ericksen-Leslie-Parodi (ELP) puntualizada en el Cap. III, es posible describir el comportamiento del CL nemático cuando es sometido al efecto del flujo cortante; esto se logra por medio del tensor de esfuerzos σ_{ij} , el vector director \hat{n} y los coeficientes de la viscosidad de Leslie α_1 a α_6 de la siguiente manera:

$$\sigma_{ij} = \alpha_1 n_i n_j V_{kp} n_k n_p + \alpha_2 n_j N_i + \alpha_3 n_i N_j + \alpha_4 V_{ij} + \alpha_5 n_j V_{ik} n_k + \alpha_6 n_i V_{jk} n_k, \quad (4.1)$$

donde

$$V_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial v_i}{\partial x_j} + \frac{\partial v_j}{\partial x_i} \right), \quad (4.2)$$

$$N_i = \dot{n}_i - \frac{1}{2} \left(\frac{\partial v_i}{\partial x_j} - \frac{\partial v_j}{\partial x_i} \right) n_j, \quad (4.3)$$

y v_i, v_j son las componentes del vector velocidad \vec{v} [31].

La parte simétrica del tensor gradiente de velocidad esta representada por V_{ij} , \vec{N} es el tensor de rotación relativa del director con respecto al fluido (descrito en el Cap. III) y α_i son los coeficientes de Leslie, los cuales se relacionan mediante la ecuación de Parodi:

$$\alpha_2 + \alpha_3 = \alpha_6 - \alpha_5. \quad (4.4)$$

De la teoría de “ELP”, es posible deducir que el torque T_v debido al flujo de corte está determinado por [28]:

$$\vec{T}_v = \vec{n} \times \left(\left(\frac{\alpha_3 - \alpha_2}{2} (\nabla \times \vec{v}) \right) \times \vec{n} - (\alpha_6 - \alpha_5) \vec{V} \cdot \vec{n} \right). \quad (4.5)$$

Este par es ilustrado en la Fig. 4.3. Sustituyendo las coordenadas del director $\hat{n}=(\text{sen } \theta(z), 0, \text{cos } \theta(z))$ en la ec. (4.5), el torque que actúa en una molécula nemática puede expresarse como:

$$T_v = (\alpha_3 \text{sen}^2(\theta) - \alpha_2 \text{cos}^2(\theta)) \frac{\partial v}{\partial z}. \quad (4.6)$$

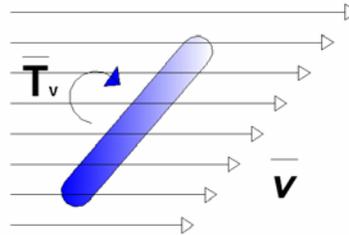


Fig. 4.3 Par en el nemático producto del flujo de corte.

Algunos autores, para el caso de otros tipos de configuraciones de celda (por ejemplo planar-planar), consideran que la contribución del coeficiente α_3 es despreciable [7], sin embargo, para este estudio sí se tomará en cuenta.

4.1.2 Par en las moléculas de CL debido al campo eléctrico

Al aplicar un campo eléctrico a través del sistema, en la molécula del nemático se induce un dipolo eléctrico que propicia un pequeño giro en la misma; esto es debido a que el vector director intenta alinearse en la dirección del campo eléctrico. La ecuación del momento inducido que propicia el giro surge de la relación entre las propiedades dieléctricas del CL y el campo eléctrico inducido a través del mismo (efectos descritos en el Capítulo II) y es:

$$T_{el} = -\frac{\epsilon_a \epsilon_0}{2} E^2 \text{sen}(2\theta), \quad (4.7)$$

donde ϵ_0 es la permitividad dieléctrica del vacío y ϵ_a representa la anisotropía dieléctrica del CL [7, 16].

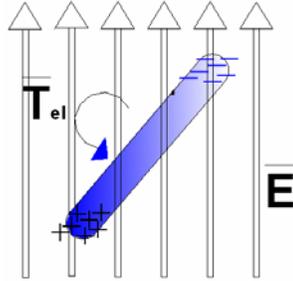


Fig. 4.4 Par en el nemático producto de un campo eléctrico.

4.1.3 Par en las moléculas de CL debido a las fuerzas elásticas

Como se mencionó en el Cap. II, los CL's presentan propiedades elásticas similares a los materiales sólidos. El momento generado debido a estas propiedades elásticas esta considerado en las constantes elásticas de la densidad de energía libre de Frank K_i . Del Cap. II, se sabe que la energía libre de distorsión debida a las fuerzas elásticas puede escribirse como

$$F_e = \frac{1}{2}K_1(\nabla \cdot \hat{n})^2 + \frac{1}{2}K_2(\hat{n} \cdot (\nabla \times \hat{n}))^2 + \frac{1}{2}K_3((\hat{n} \cdot \nabla) \cdot \hat{n})^2, \quad (4.8)$$

donde K_1 , K_2 y K_3 constituyen la apertura (splay), torsión (twist), y pandeamiento (bend) respectivamente. Teniendo en cuenta que en este estudio no se consideran fuerzas que provoquen una torción en la molécula nemática, de la ec. (4.8), el torque elástico puede escribirse como

$$T_e = K_{11} \sin^2 \theta + K_{33} \cos^2 \theta \left(\frac{d^2 \theta}{dz^2} \right) + (K_{11} - K_{33}) \sin \theta \cos \theta \left(\frac{d\theta}{dz} \right)^2. \quad (4.9)$$



4.1.4 Equilibrio de momentos en un CL dentro de una celda híbrida

La configuración de equilibrio se obtiene de la suma de los efectos (momentos) descritos anteriormente en las ecs. (4.6), (4.7) y (4.9). El resultado de la suma de efectos es una ecuación diferencial homogénea no lineal de segundo orden:

$$\begin{aligned} \tau_{Elástico} + \tau_{Flujo\ cortante} + \tau_{Campo\ eléctrico} = 0, \\ \left(K_{11} \sin^2 \theta + K_{33} \cos^2 \theta \right) \left(\frac{d^2 \theta}{dz^2} \right) + (K_{11} - K_{33}) \sin \theta \cos \theta \left(\frac{d\theta}{dz} \right)^2 \\ + \left(\alpha_3 \sin^2 \theta - \alpha_2 \cos^2 \theta \right) \frac{dv}{dz} - \frac{\epsilon_a \epsilon_0}{2} E^2 \sin 2\theta = 0. \end{aligned} \quad (4.10)$$

Nótese que la parte derecha de la igualdad es cero ya que se considera sólo el estado estacionario de las moléculas del CL nemático. Con objeto de facilitar la solución numérica de la ec. (4.10) y debido a que los valores de las constantes elásticas de Frank son muy similares, es razonable considerar que $K_1 = K_2 = K_3 = K$, en consecuencia (4.10) se simplifica.

$$K \left(\frac{d^2 \theta}{dz^2} \right) - \frac{\epsilon_a \epsilon_0}{2} E^2 \sin(2\theta) + \left(\alpha_3 \sin^2 \theta - \alpha_2 \cos^2 \theta \right) \left(\frac{dv}{dz} \right) = 0. \quad (4.11)$$

El último torque importante que actúa sobre las moléculas nemáticas es el causado por la interacción entre el CL y las paredes de la celda híbrida. En este trabajo se supondrá un anclaje fuerte de las moléculas con la pared de dicha celda. Debido a lo anterior, se toman dichos anclajes como las condiciones de frontera en la solución numérica de la ec. (4.11), las cuales serán:

$$\theta \left(z = -\frac{1}{2} \right) = 0 ,$$

$$\theta \left(z = \frac{1}{2} \right) = \frac{\pi}{2} .$$



4.1.5 Cambio de la velocidad del CL

El cambio de la velocidad “ v ” en función de la posición “ z ” dentro de la celda (dv/dz) es el único término que se desconoce en la ec. (4.11). La expresión de conservación de momento lineal para CL’s nemáticos nos describe esta variación de la velocidad como función de la posición en la celda [28].

$$\frac{\partial}{\partial z} \left[\eta(\theta) \frac{dv}{dz} \right] = 0,$$

$$\frac{dv}{dz} = \frac{b}{\eta(\theta)}, \quad (4.12)$$

$$\eta(\theta) = \alpha_1 \sin^2 \theta \cos^2 \theta + \eta_b \sin^2 \theta + \eta_c \cos^2 \theta, \quad (4.13)$$

donde $\eta(\theta)$ representa la viscosidad del CL como función de la posición $\theta(z)$ del director, η_b , y η_c corresponden al segundo y tercer coeficiente de Miesowicz y “ b ” es una constante de integración. Resolviendo las ecs. (4.11) y (4.12) es posible determinar la magnitud de la reorientación ejercida sobre las moléculas de CL a consecuencia de los efectos externos aplicados.

4.1.6 Orientación del vector director dentro de la celda híbrida

Al imprimir un campo eléctrico y un flujo de corte en el sistema, se propicia una reorientación del vector director en la molécula nemática, el proceso para determinar la magnitud de dicha reorientación en cada punto de la celda consiste en resolver las ecuaciones (4.11) y (4.12) simultáneamente, para esto se escribirán primero ambas ecuaciones en términos de variables adimensionales (esto adicionalmente permitirá obtener resultados aplicables para cualquier tamaño de celda), posteriormente se pondrá la ec. (4.11) en función de (4.12) y se solucionarán numéricamente.



Para lo anterior el primer paso consiste en definir las siguientes variables adimensionales:

$$\xi = \frac{z}{l},$$

$$\tilde{v} = \frac{v}{|v_0|},$$

$$\tilde{\eta}(\theta) = \frac{\eta(\theta)}{\gamma}.$$

Se sustituyen en (4.11) la ec. (4.12) y las variables definidas en el punto anterior obteniendo con ello:

$$\left(\frac{d^2 \theta}{l^2 d\xi^2} \right) - \frac{\varepsilon_a \varepsilon_0}{2K} E^2 \text{sen}(2\theta) + \frac{b}{K \tilde{\eta}(\theta) \gamma} (\alpha_3 \text{sen}^2 \theta - \alpha_2 \text{cos}^2 \theta) = 0. \quad (4.14)$$

Por otra parte, se normaliza la ec. (4.12) sustituyendo las variables adimensionales antes definidas y para simplificar la expresión resultante se crea una nueva variable que llamaremos constante “C”, la cual que se formará por³:

$$\frac{d\tilde{v}}{d\xi} = \frac{\text{signo}(v_0)C}{\tilde{\eta}(\theta)}, \quad (4.15)$$

$$C = \frac{l \cdot b}{\gamma v_0}. \quad (4.16)$$

De la ec. (4.16) se despeja “b”, se sustituye en (4.14) y se definen dos nuevas constantes también adimensionales “q” y “m’”:

$$q = \frac{\varepsilon_a \varepsilon_0 l^2}{2K} E^2, \quad (4.17)$$

$$m' = \frac{|v_0| l}{K}. \quad (4.18)$$

³ Recordar que $|V_0| = V_0 \cdot \text{signo}(V_0)$



El efecto neto del campo eléctrico aplicado sobre el nemático a través de la celda híbrida está representado por q y la magnitud y sentido del flujo cortante sobre el CL es m' . Sustituyendo q y m' en (4.14) se obtiene la ecuación que describe la orientación del director bajo el efecto de un campo eléctrico y un flujo de corte.

$$\left(\frac{d^2\theta}{d\xi^2} \right) - q \sin(2\theta) + \frac{m}{\tilde{\eta}(\theta)} (\alpha_3 \sin^2 \theta - \alpha_2 \cos^2 \theta) = 0, \quad (4.19)$$

donde

$$m = m' C$$

En términos de las variables normalizadas, las condiciones de frontera para el ángulo y la velocidad toman la forma:

$$\begin{aligned} \theta(\xi = -\frac{1}{2}) &= 0, & \tilde{v}(\xi = -\frac{1}{2}) &= -\text{signo}(v_0), \\ \theta(\xi = \frac{1}{2}) &= \frac{\pi}{2}, & \tilde{v}(\xi = \frac{1}{2}) &= \text{signo}(v_0). \end{aligned}$$

4.1.7 Velocidad de flujo del CL

Para determinar la ecuación que rige la velocidad con que fluye el CL como función de la posición en la celda, se integra la ec. (4.15) y se despeja el valor de la constante C

$$\int_{-\text{signo}(v_0)}^{+\text{signo}(v_0)} d\tilde{v} = \text{signo}(v_0) C \int_{-1/2}^{1/2} \frac{d\xi}{\tilde{\eta}(\theta)},$$

$$C = \frac{2}{\int_{-1/2}^{1/2} \frac{d\xi}{\tilde{\eta}(\theta)}}. \quad (4.20)$$

sustituyendo el C en (4.15) e integrando, se halla la ecuación que describe la velocidad con que fluye el CL como función de la posición en la celda.



$$\mathcal{V}(\xi) = -\text{signo}(v_0) \left[1 - \frac{\int_{-1/2}^{\xi} \frac{d\xi}{\eta(\theta)}}{\int_{-1/2}^{\xi} \frac{d\xi}{\eta(\theta)}} \right]. \quad (4.21)$$

4.2 Método numérico de solución

Para encontrar la configuración de equilibrio del director se debe resolver la ecuación diferencial (4.19), la cual es de segundo orden, no lineal en $\theta(\xi)$ y no se tienen condiciones iniciales sino de frontera; es por ello que para encontrar su solución (de forma numérica) se recurrirá a una variante del método de prueba y error o método “*shooting*”.

Dicho método de prueba y error nos resuelve el inconveniente de tener sólo condiciones de frontera en la ec. (4.19), ya que permite reducir la solución de un problema (ecuación) con condiciones de frontera de la forma:

$$\theta''(\xi) = f(\xi, \theta) \quad \theta(a) = \alpha \quad \theta(b) = t$$

a uno con condiciones iniciales:

$$\theta''(\xi) = f(\xi, \theta) \quad \theta(a) = \alpha \quad \theta'(a) = \beta$$

donde β es un parámetro que se encuentra numéricamente. La lógica de este método es la siguiente: a partir de la condición de frontera conocida $\theta(b)=t$, se encuentra por reiteración una condición inicial $\theta'(a)=\beta$ que satisfaga $\theta(b)=t$; para ello se iguala la condición conocida $\theta(b)$ con la buscada $\theta'(a)$ de la siguiente forma:

$$\theta(b) = \int \theta'(a), \quad (4.22 \text{ a})$$

lo cual implica que se cumpla la igualdad

$$t = \int \beta, \quad (4.22 \text{ b})$$



El método consiste en buscar numéricamente el valor de β que satisface la ec. (4.22 b). El procedimiento para encontrar dicho valor “ β ” radica en dar primero una condición conocida $\theta(a)=\alpha$ (en nuestro sistema la condición conocida es: $\theta(\xi=1/2)=90^\circ$) y un valor inicial “ β_1 ” en $\theta'(a)=\beta_1$, de tal forma que se encuentre una función que pase por el punto $\theta(a)=\alpha$ y cuya pendiente intercepte $\theta(b)=t$ (Fig. 4.5). Esto se logra integrando la ec. (4.22 b) de “ a ” a “ b ” numéricamente usando uno de los procedimientos estándar de problemas con valor inicial (como Runge-Kutta, Euler-Gauss, etc.) y se obtiene δ_1 [32].

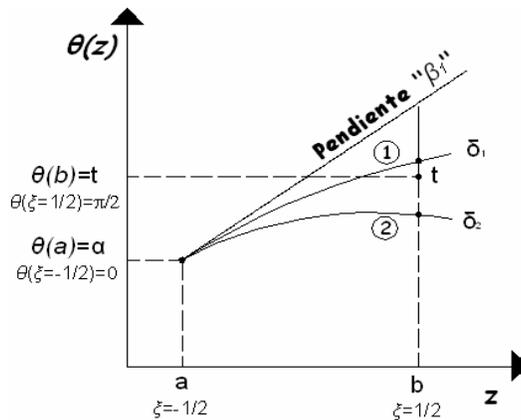


Fig. 4.5 Solución por método shooting de un problema con condiciones de frontera.

En el método *shooting* original, si el valor inicial dado “ β_1 ” no satisface las condiciones de frontera esperadas $\theta(b)=t$, se selecciona un segundo valor “ β_2 ” y de no satisfacer tampoco este las condiciones de frontera, se interpolan los valores que dieron δ_1 y δ_2 para encontrar un “ β_3 ” y se repite el proceso hasta encontrar el valor “ β_x ” que se aproxime tanto como se desee a cumplir la condición de frontera deseada.

En este trabajo, se hace una ligera variante del método *shooting*, la cual consiste en dar un intervalo de valores iniciales $\beta_{min} \leq \beta \leq \beta_{max}$, calcular numéricamente la integral de “ a ” a “ b ” para cada uno de estos datos y con ellos obtener una tabla de puntos $\delta_{min} \leq \delta \leq \delta_{max}$; posteriormente se interpolan los valores de dicha tabla con el



fin de asegurar que algún “ δ_x ” intercepte con el punto “ t ” que satisface la condición $\theta(b)=t$ y con ello localizar el valor exacto de la condición inicial “ β ” buscada.

Para encontrar con mayor facilidad y exactitud el valor “ β ”, se grafican los datos calculados de la tabla $\delta_{min} \leq \delta \leq \delta_{max}$ contra el valor del ángulo “ θ ” que resulta de sustituir y resolver “ δ_x ” en (4.19) para un flujo y un campo determinados (como se muestra en el ejemplo de la Fig. 4.6). De la gráfica se selecciona el valor “ β ” que satisface el estado $\theta(\zeta=1/2)=90^\circ$ que corresponde a la condición de frontera conocida.

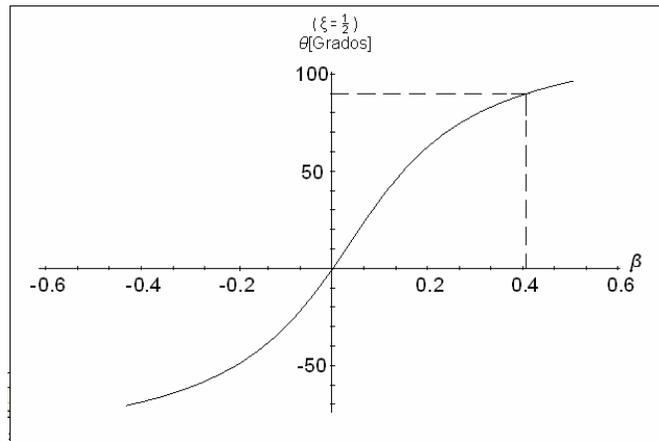


Fig. 4.6 Gráfica de “ β ” vs “ $\theta(\zeta=1/2)$ ”.

Para hacer este proceso de forma ágil y en menor tiempo, se programa en un ordenador una secuencia de pasos que repitan de forma automática el procedimiento antes descrito y con él se busca la condición “ β ” para distintos valores de las constantes “ m ” y “ q ”; con lo cual queda resuelto el problema de las condiciones de frontera y con ello la solución de la ec. (4.19).



4.3 Resultados

El procedimiento descrito en el punto anterior es repetido para diferentes valores de flujo $0 \leq q \leq 10$ y campo $-20 \leq m \leq 10$ y se grafican los resultados que arroja la ec. (4.19). El cálculo numérico es realizado para el CL tipo 4-n-pentil-4-cianobipenil (5CB) cuyos coeficientes de Leslie a 25°C son $\alpha_1 = -0.006$ [Pa-s], $\alpha_2 = -0.0812$ [Pa-s], $\alpha_3 = -0.0036$ [Pa-s], $\alpha_4 = 0.0652$ [Pa-s], $\alpha_5 = 0.064$ [Pa-s] y $\alpha_6 = -0.0208$ [Pa-s] y, su constante elástica toma el valor de $k = 12$ [pN].

4.3.1 Variación del ángulo del director como función de la posición en la celda híbrida

Los resultados arrojados por la ec. (4.19) representan físicamente la dependencia del ángulo $\theta(\xi)$ como función de la posición dentro de la celda híbrida bajo la influencia de un valor de flujo y un campo dados. Para un mejor análisis se muestran las gráficas y explicación de los resultados de dos maneras distintas: ángulo vs ancho de celda como función de un campo q variable para un flujo m constante y el ángulo vs ancho de celda para un campo q constante y un flujo variable m .

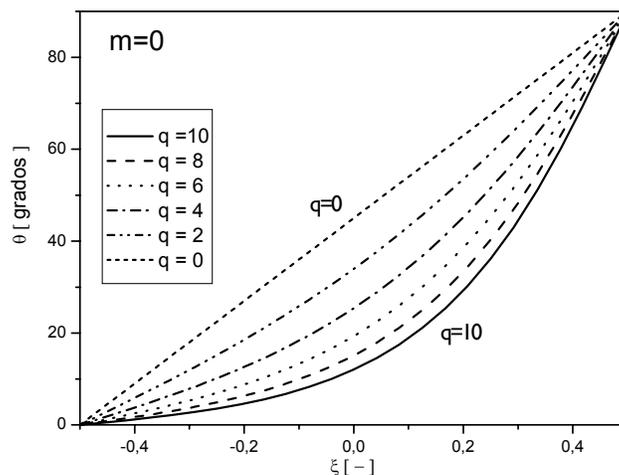


Fig. 4.6 Ángulo " θ " vs ancho de celda " ξ " para distintos valores de campo y sin flujo ($m=0$).



Los efectos obtenidos para el caso de un flujo nulo constante ($m=0$) y campo variable se muestran en la Fig. 4.6, aquí se aprecia que conforme el valor del campo aplicado aumenta, el dipolo eléctrico de las moléculas nemáticas se alinea con este, y en consecuencia el ángulo formado entre la vertical y el vector director del CL ($\theta(\xi)$) decrece.

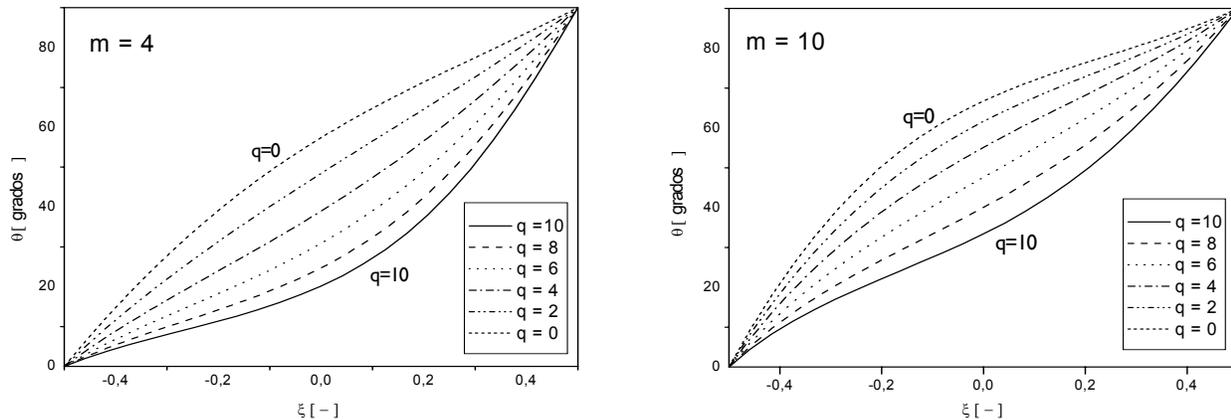


Fig. 4.7 Ángulo vs ancho de celda para distintos valores de campo q y un flujo constante $m \geq 0$.

Cuando el flujo es $m \geq 0$, el ángulo $\theta(\xi)$ siempre es positivo sin importar el valor del campo aplicado, además se tiene que para cualquier punto en la celda (diferente de las condiciones de frontera) la molécula nemática tiende a alinearse verticalmente al aumentar el campo eléctrico (Fig. 4.7).

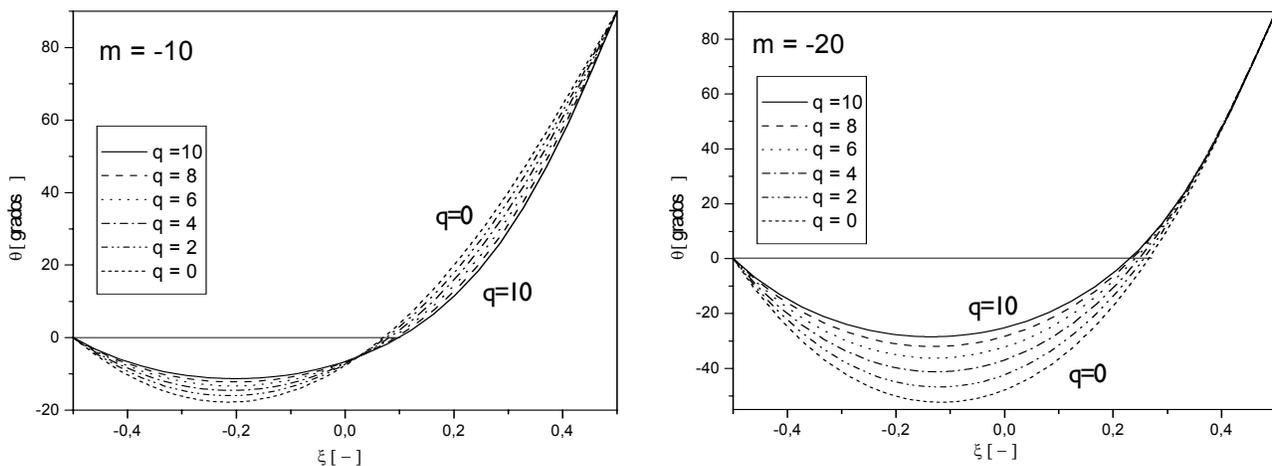


Fig. 4.8 Ángulo vs ancho de celda para distintos valores de campo q y un flujo constante $m < 0$.

En la Fig. 4.8, es posible visualizar que cuando el flujo es $m < 0$, el ángulo $\theta(\xi)$ toma valores negativos que se hacen más negativos y perduran así en una mayor región de la celda conforme el campo aplicado se acerca a cero. La interpretación física de este fenómeno se muestra en la Fig. 4.9, donde se aprecia la forma en como la molécula nemática deja de tener una posición perpendicular a las placas de la celda, comienza a girar en sentido anti-horario, llega a un valor $\theta(\xi)$ mínimo y gira en sentido horario hasta quedar paralela a las placas de la celda en $\xi = \pm 1/2$. Lo anterior es debido a que al aplicar un flujo “ m ” grande en dirección opuesta al sentido natural de orientación de las moléculas dentro de la celda, se provoca un par que las hace girar en dirección anti-horaria y, conforme ellas se aproximan a $\xi = \pm 1/2$, debido a las condiciones de frontera consideradas (anclaje fuerte de las moléculas en las paredes de la celda), el par de reorientación se hace mayor que el ejercido por el flujo y en consecuencia la suma de efectos a lo ancho de la celda resulta semejante a lo mostrado en la Fig. 4.9.

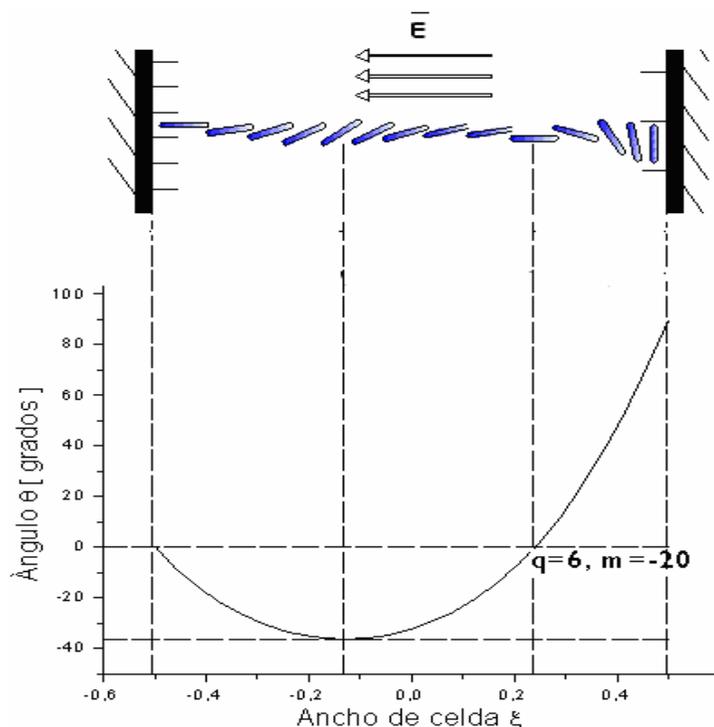


Fig. 4.9 Orientación de las moléculas nemáticas cuando el ángulo $\theta(\xi)$ toma valores negativos ($q=6, m=-20$).



En la Fig. 4.10 se ha graficado el ángulo vs ancho de la celda para un campo q constante y un flujo variable m . En dicha figura se aprecia que conforme se incrementa el valor del campo, el ángulo $\theta(\xi)$ se aproxima a cero (molécula perpendicular a las placas). También es posible apreciar el efecto contrario, es decir, cuando se aplica un campo muy pequeño o nulo, la molécula nemática tiende a alinearse de forma planar en una región más amplia de la celda. Cabe señalar que aunque el valor del campo aplicado sea nulo y el del flujo cortante sea muy grande, el ángulo $\theta(\xi)$ sólo podrá ser $\pi/2$ en la condición de frontera $\theta(\xi=1/2) = \pi/2$, esto se puede demostrar a partir de la ec. (4.19), donde para un flujo muy grande, θ_{max} resulta ser:

$$\theta_{max} = \arctan \sqrt{\left(\frac{\alpha_2}{\alpha_3} \right)}$$

Para el caso de un CL nemático tipo 5CB $\theta_{max} \approx 78.1^\circ$

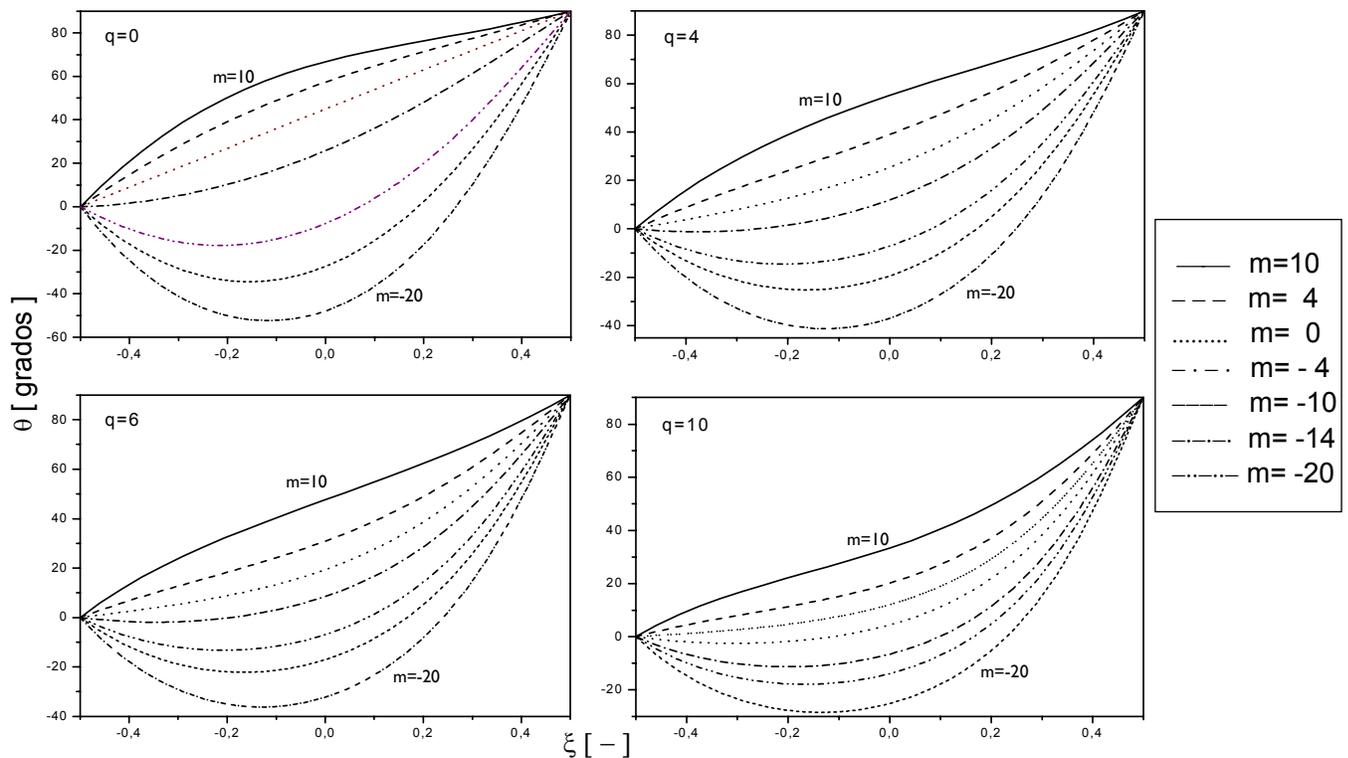


Fig. 4.10 Ángulo vs Ancho de celda para un flujo “ q ” constante y campo variable “ m ”.



Para un flujo y un campo nulos, el ángulo del nemático se comporta de manera lineal bajo la condición de constantes elásticas iguales (Fig. 4.6). La suma de los efectos para algunos otros valores de campo y flujo dan como resultado (debido a la cancelación entre efectos contrarios) también un comportamiento casi lineal en la mayor parte del ancho de la celda híbrida (Fig. 4.11). Estas combinaciones de flujo y campo resultan interesantes ya que de aplicarse en sistemas electro-reológicos, propiciarían un control rápido y muy sencillo de la conducta de la molécula nemática debido a su comportamiento lineal.

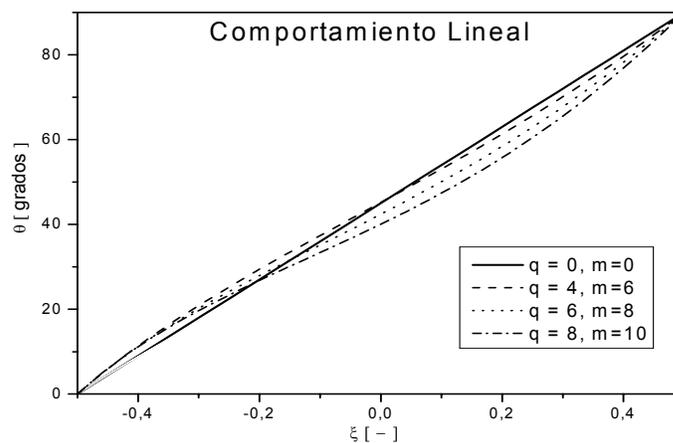


Fig. 4.11 *Comportamiento lineal en algunas combinaciones de flujo y campo.*

4.3.2 Perfil de velocidad del Cristal Líquido

Una vez obtenida la dependencia del ángulo como función de la posición, es posible calcular la velocidad del flujo dentro de la celda sustituyendo en la ec. (4.21) la función $\theta(\xi)$ obtenida, la ec. (4.13) y los coeficientes de Leslie del CL 5CB. A partir de graficar la (4.21) se observan los resultados mostrados en la Fig. 4.12.

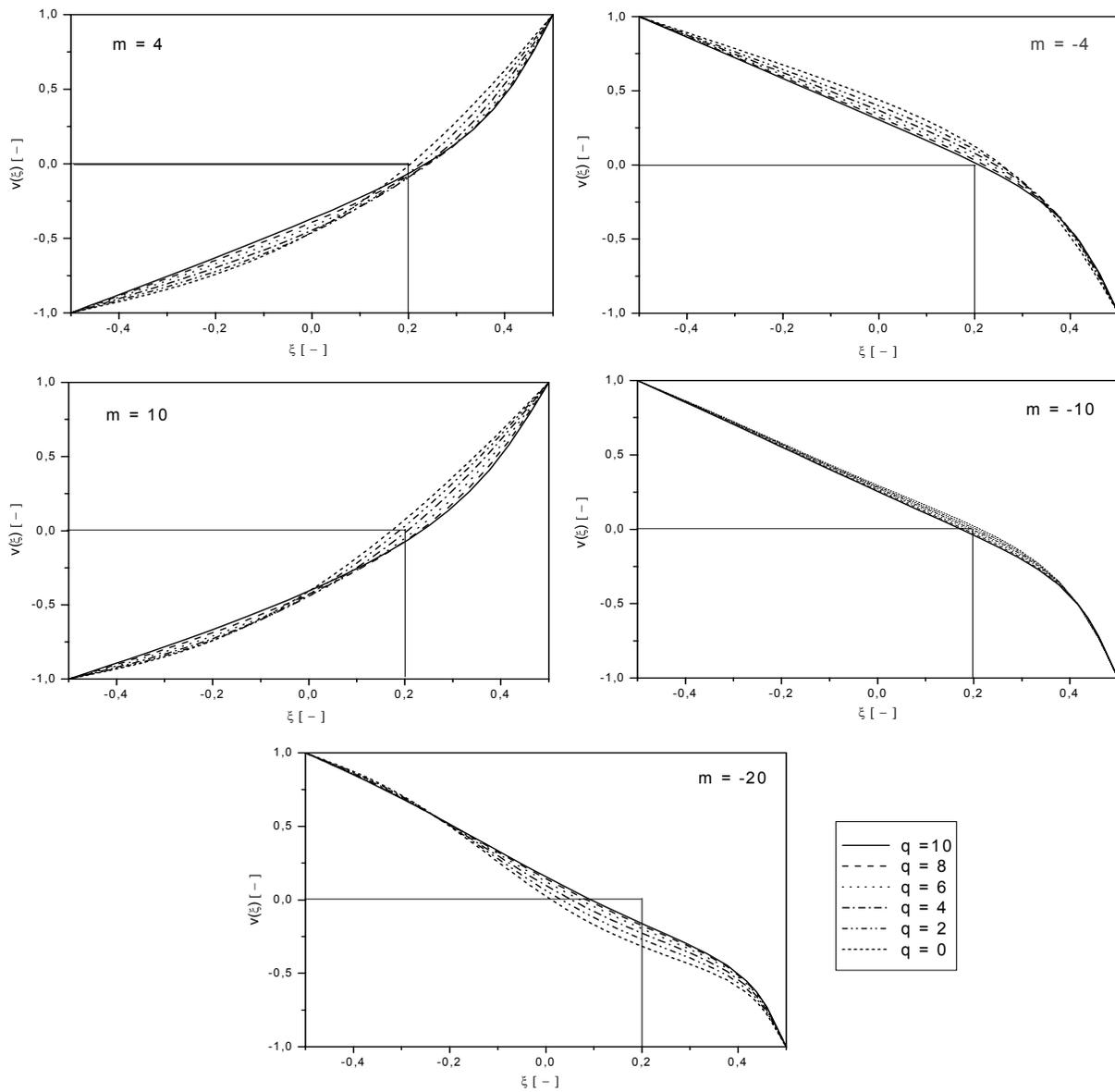


Fig. 4.12 Velocidad de flujo de las moléculas de CL.

Al aplicar el flujo cortante en direcciones opuestas a partir de cada extremo de la celda (paredes), existe una zona dentro de la misma donde la velocidad de flujo es nula. Las gráficas de la Fig. 4.12 reflejan que para todas las cantidades de flujo



aplicado el punto dentro de la celda donde la velocidad es cero se localiza siempre en la mitad superior de la misma, muy cerca del valor $\xi=0.2$ en todos los casos.

Adicionalmente, es posible observar que cuando $m>0$ el perfil de velocidad $v_x(\xi)$ responde de manera menos sensible a la variación del flujo que a la variación de campo, cuando $m<0$ sucede el fenómeno inverso y, en el caso particular de $m=-10$, se tiene que para todos los valores de campo aplicados, el perfil de velocidad se comporta de manera casi lineal durante gran parte del espesor de la celda.

4.3.3 Viscosidad del CL dentro de la celda híbrida

La viscosidad del CL nemático relaciona la fuerza cortante por unidad de área con la rapidez de deformación y está dada por la ec. (4.13).

$$\eta(\theta) = \alpha_1 \sin^2 \theta \cos^2 \theta + \eta_b \sin^2 \theta + \eta_c \cos^2 \theta, \quad (4.13)$$

donde η_c y η_b son los coeficientes de Miesowicz definidos en el Cap. III.

Para conocer como se comporta la viscosidad local en cada punto de la celda se sustituyen los valores del ángulo como función del ancho de la celda (calculados en el punto 4.3.1 de este capítulo) en la ec. (4.13), a partir de la cual se derivan los resultados que se muestran en las Figs. 4.13 y 4.14.

Es fácil percibir a partir de la Fig. 4.13 que la viscosidad es, en todos los casos, máxima en la parte inferior de la celda y mínima en la parte superior; esto se debe al tratamiento físico aplicado en las paredes de la celda, donde las moléculas del nemático permanecen siempre perpendiculares al flujo (en $\xi=-1/2$) presentándose en consecuencia mayor resistencia al movimiento y por ende una mayor viscosidad. Lo anterior se aprecia con más claridad en la Fig. 4.14 donde se muestra que para



orientaciones planares del nemático ($\xi=1/2$), el CL presenta el valor mínimo de viscosidad y para configuraciones homeotrópicas ($\xi=-1/2$) ésta es máxima.

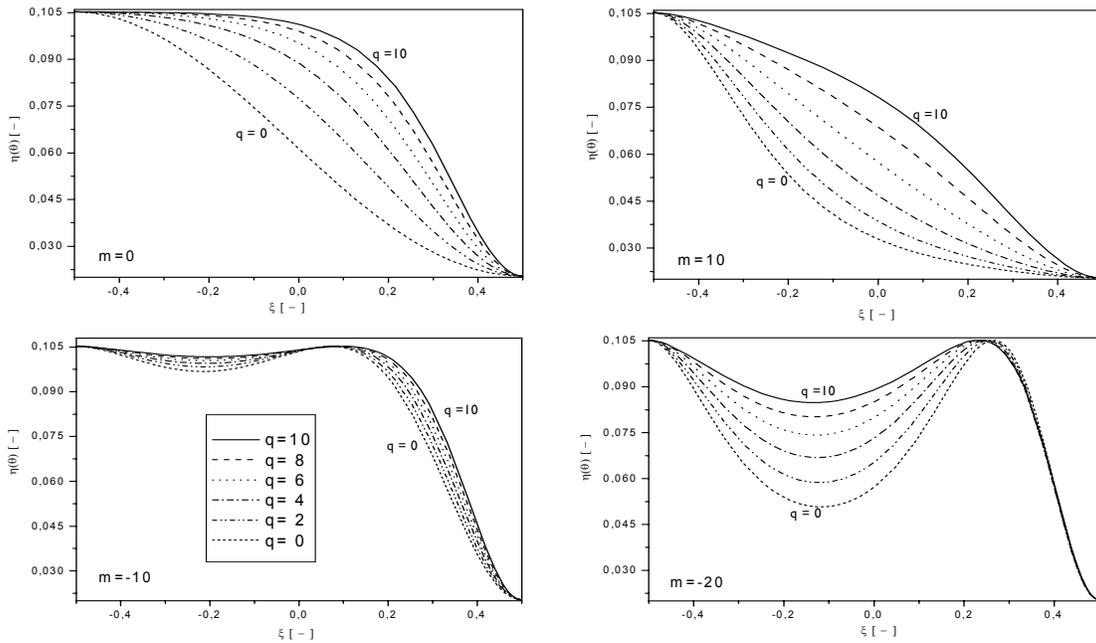


Fig. 4.13 Variación de la viscosidad vs ancho de la celda (flujos “m” constantes).

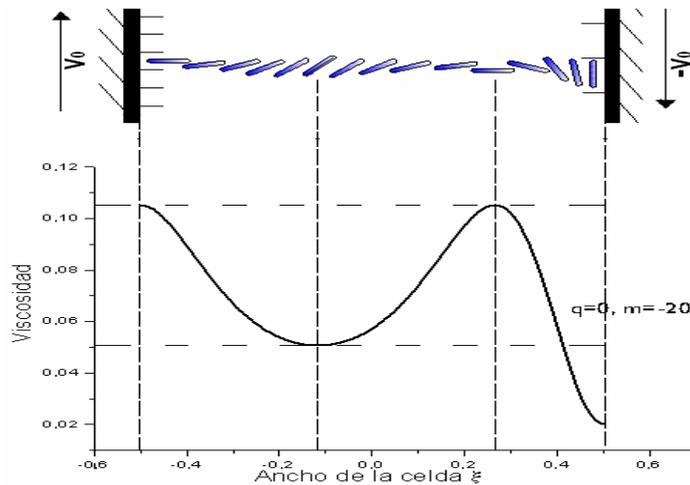


Fig. 4.14 Relación entre viscosidad y posición de la molécula nemática.



Por otra parte, al graficar la viscosidad vs ancho de celda para campos variables y flujos constantes (Fig. 4.15), se tiene que para algunas combinaciones de flujo y campo la viscosidad puede ser máxima en más de un punto a lo ancho de la celda e incluso podemos provocar que ésta tenga el valor máximo en la mayor parte de la misma (por ejemplo para la combinación $m=-10$, $q=10$).

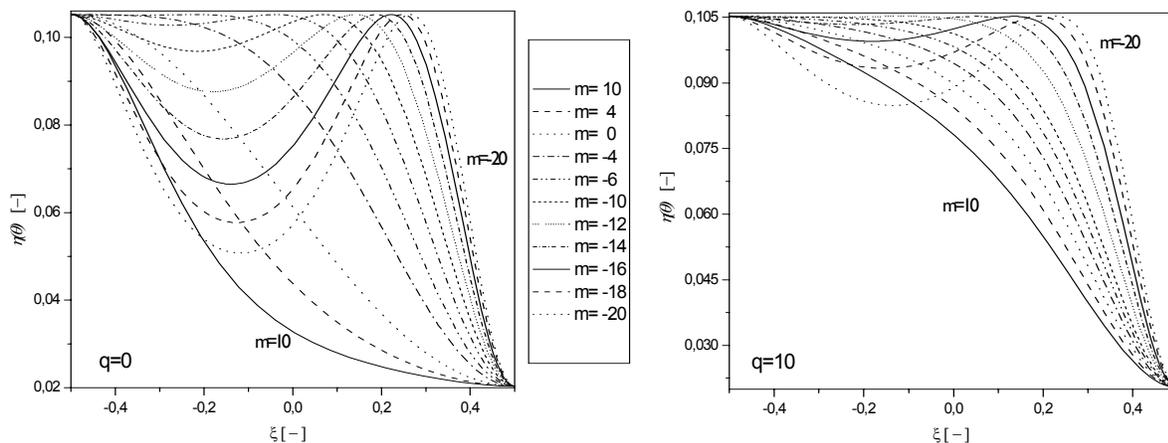


Fig. 4.15 Variación de la viscosidad a lo ancho de la celda (campos “ q ” constantes).

Finalmente, al comparar las gráficas del ángulo del director con las de la viscosidad, es fácil relacionar la interpretación física entre ambos resultados ya que, por ejemplo, para el caso de un flujo $m=-10$ (Fig. 4.16) se encuentra que en la primera porción de la gráfica, cuando el ángulo es cero (molécula perpendicular al flujo), la viscosidad es máxima, cuando el ángulo se hace negativo la viscosidad disminuye, en la parte media de la gráfica cuando $\theta(\xi)$ regresa al valor cero, la viscosidad vuelve a ser máxima y finalmente cuando el ángulo comienza a crecer hasta llegar a θ_{max} (molécula paralela al flujo), la viscosidad disminuye hasta alcanzar su valor mínimo en $\xi=1/2$.

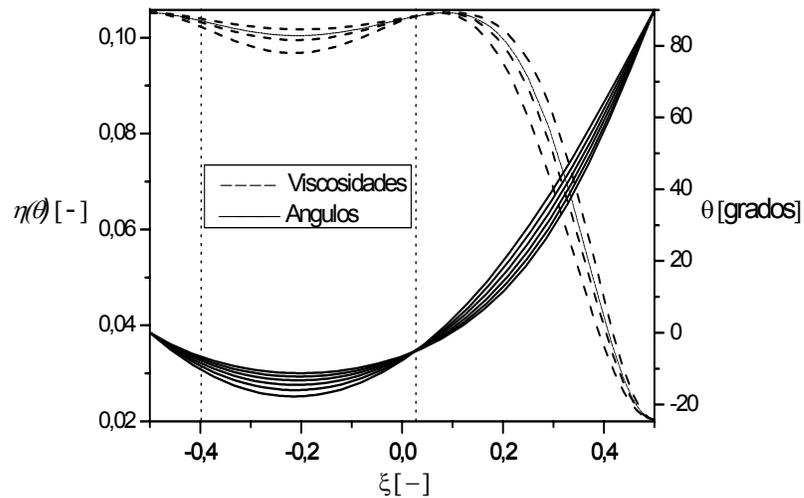


Fig. 4.16 Comparación entre el cambio en la viscosidad del CL y la orientación de sus moléculas.

4.3.4 Viscosidad promedio

La viscosidad promedio representa el valor de la viscosidad media del CL nemático en todo lo ancho de la celda híbrida y está dada por la expresión

$$\bar{\eta} = \int_{-1/2}^{1/2} \eta(\theta) d\xi. \quad (4.23)$$

La cual al graficar como función del campo q (para diferentes flujos) y del flujo m (para diversos campos) nos arroja los resultados de las Figs. 4.17 y 4.18, respectivamente.

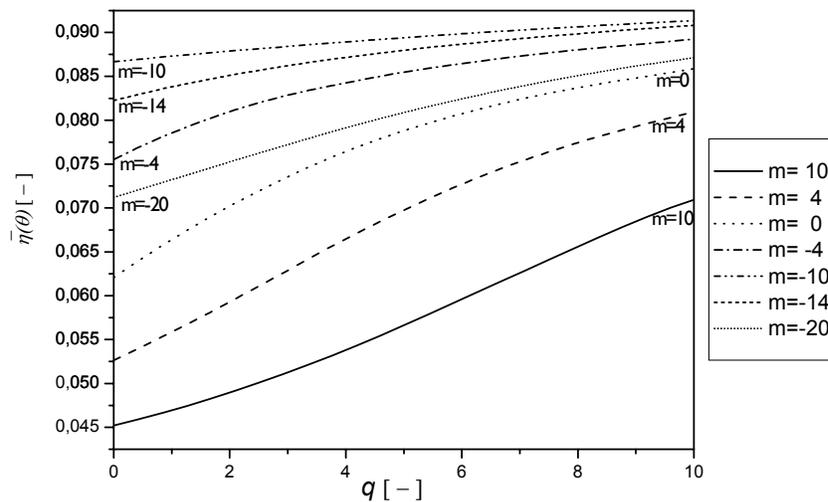


Fig. 4.17 Viscosidad promedio para diferentes valores de flujo.

En la Fig. 4.17 se refleja con claridad el fenómeno electro-reológico en el sistema, ya que se aprecia que es posible controlar y modificar el valor de la viscosidad de manera importante al varear únicamente el campo eléctrico aplicado (con $m=0$); además se observa que conforme se hace disminuir el valor del flujo desde $m=10$, la viscosidad comienza a crecer pero no lo hace indefinidamente, sino que tiende a un valor máximo correspondiente justamente al valor de la constante de Miesowicz η_C (para el CL 5CB $\eta_C=0.1052$ [Pa-s]); esto refleja lo acertado de la relación entre los resultados obtenidos en este análisis numérico y lo que sucede físicamente en el CL, ya que η_C representa la geometría de la molécula nemática paralela al gradiente de velocidad (Ver Cap III) y físicamente resulta lógico pensar que ésta configuración (molécula perpendicular a las paredes de la celda) represente el valor máximo de viscosidad. Por otra parte, la viscosidad mínima calculada tiende al valor η_b de los coeficientes de Miesowicz correspondiente a una orientación horizontal de la molécula nemática (para el CL 5CB $\eta_b=2.04 \times 10^{-2}$ [Pa-s]), orientación que físicamente es lógico provoque el valor mínimo de viscosidad en el sistema; finalmente con estos valores tan diversos de viscosidad obtenidos se demuestra



cuan grande puede ser el control de la misma en los CL's nemáticos dentro de esta configuración de celda. Un fenómeno que también resulta interesante en la Fig. 4.17 es el hecho de que cuando los valores de flujo decrecen desde $m=0$, la viscosidad aumenta, pero cuando estos llegan al valor $m=-10$, debido a la combinación de efectos (campo y flujo), la viscosidad comienza a disminuir gradualmente.

Por otra parte, en la Fig. 4.18 se puede apreciar el comportamiento no Newtoniano del CL, para hacerlo más evidente se muestra seccionada la gráfica del flujo m vs viscosidad promedio para todos los valores de campo. En la primera parte de esta gráfica ($-20 < m < -10$) se aprecia que conforme es menor el valor del flujo aplicado (no en magnitud sino en dirección), la resistencia que presenta el CL a fluir es mayor, es decir se presenta el fenómeno conocido como “*shear thinning*”; en la segunda sección ($-10 < m < 0$) ocurre el efecto contrario, cuanto menor sea el esfuerzo aplicado en el CL, este presenta menor viscosidad y por ello fluye más fácilmente (fenómeno “*shear thickening*”); finalmente en la tercera sección de la Fig. 4.18 ($0 < m < 10$) se repite nuevamente el efecto “*shear thinning*” pero de forma más suave y con valores de viscosidad menores.

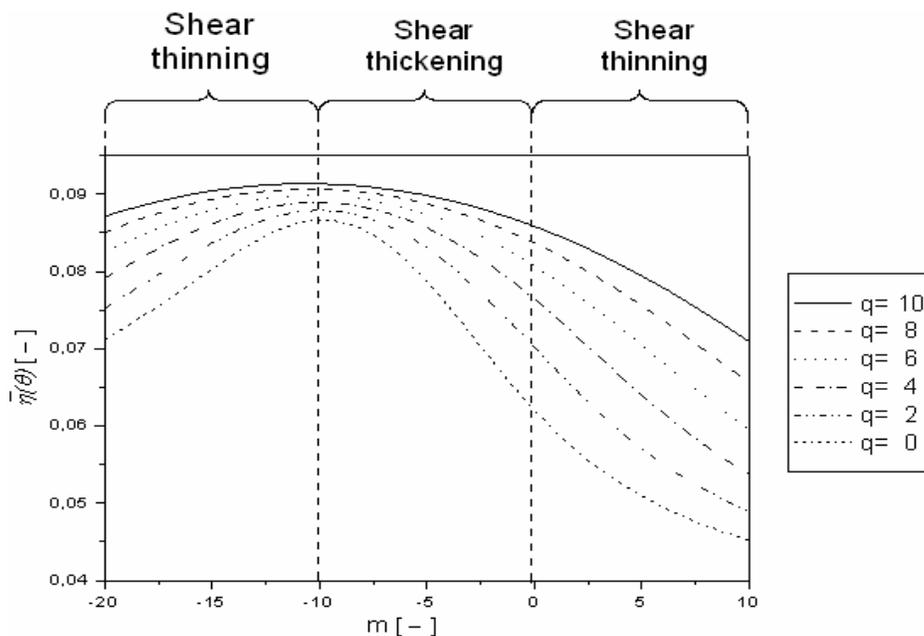


Fig. 4.18 Variación de la viscosidad para diferentes valores de campo.



Estos resultados son por de más interesantes y reflejan la importancia de conocer el efecto del flujo y campo simultáneos en los CL's, ya que al modificar el flujo dentro de la celda híbrida es posible lograr que el CL se comporte como un fluido dilatante o pseudoplástico según se desee, además aplicando un campo eléctrico es posible aumentar o disminuir la magnitud de la viscosidad media y si dicho campo es muy intenso, los efectos no Newtonianos en el CL se hacen menos evidentes, características imposibles de conseguir en los líquidos comunes.

4.3.5 Primera diferencia normal de esfuerzos

Con la primera diferencia normal de esfuerzos (N_1) es posible determinar los efectos producidos en el proceso de reorientación de las moléculas del CL nemático, ésta se calcula a partir de la ec. (3.7) descrita en el Cap. III:

$$N_1 = \sigma_{xx} - \sigma_{zz},$$

donde σ_{zz} y σ_{xx} son las componentes del tensor de esfuerzos σ_{ij} descrito en la teoría ELP (ec. (3.9)). Desarrollando dicho tensor de esfuerzos para un flujo de corte con la geometría descrita en la Fig. 4.2, se tiene que N_1 está dada por la expresión:

$$N_1 = -\frac{|v_0|}{2l} \sin 2\theta [\alpha_1 \cos 2\theta + \alpha_2 + \alpha_3] \frac{dv}{d\xi}, \quad (4.24)$$

donde el término $|v_0|$ se despeja de la ec. (4.18) de este capítulo. Los resultados arrojados por (4.24) son mostrados en las Figs. 4.19 y 4.20.

Cuando el flujo es negativo el efecto del campo eléctrico influye muy poco sobre el valor de N_1 (Fig. 4.19), pero cuando se trata de flujos positivos, la influencia del campo es significativa en todo lo ancho de la celda aunque los valores de N_1 en este



caso, resultan ser menores al 50% en magnitud que los conseguidos en flujos negativos.

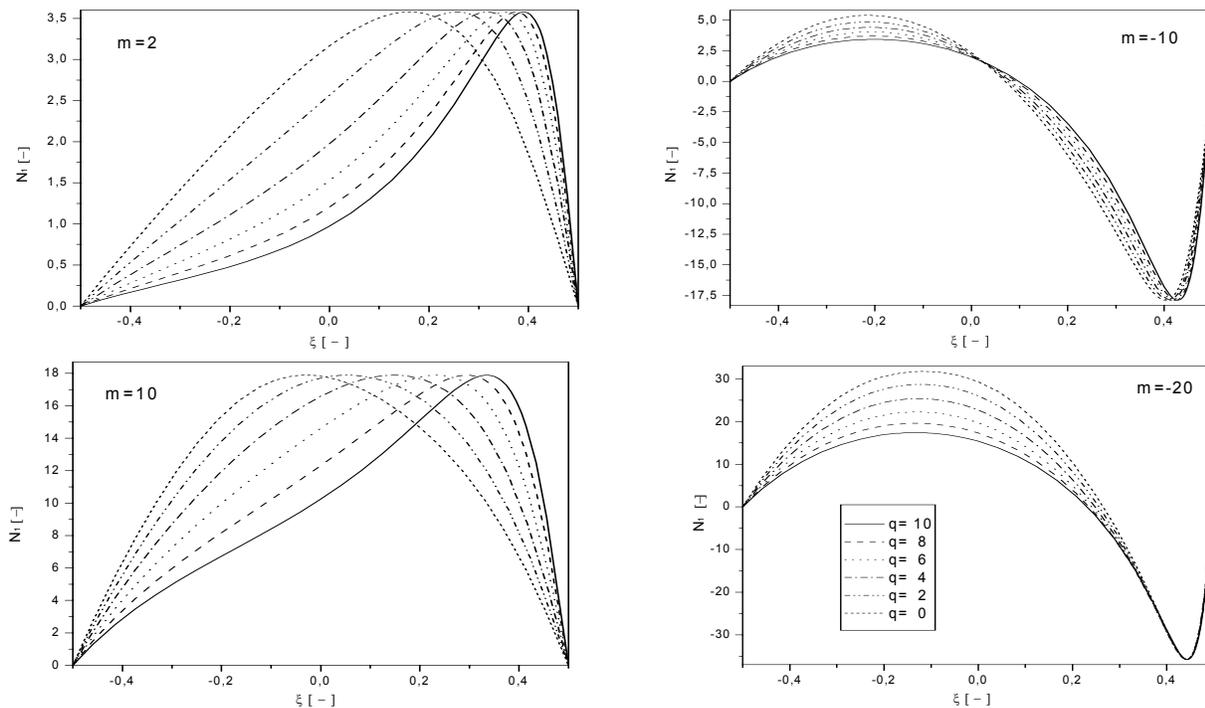


Fig. 4.19 Primera diferencia normal de esfuerzos vs espesor de la celda ($m=\text{cte}$).

En la Fig. 4.20 se aprecia que cuando el flujo es nulo o muy pequeño, casi no existen esfuerzos en las paredes de la celda, esto se puede ver más fácilmente en el caso $m=0$, donde N_1 resulta ser cero para todos los valores de campo aplicado, es decir, la primera diferencia normal de esfuerzos es nula e independiente de la orientación (vertical u horizontal) de la molécula nemática y por ello de la aplicación del campo eléctrico cuando el flujo es cero. También se observa que cuando $m > 0$, N_1 toma sólo valores positivos que indican la existencia de esfuerzos que propician repulsión entre las placas de la celda; mientras que cuando $m < 0$ en la mitad inferior de la misma, N_1 es predominantemente positiva y se convierten en predominantemente negativa conforme se acerca a la mitad superior de la celda; en esta parte la magnitud de N_1 se modifica paulatinamente conforme el valor del



campo aplicado disminuye. Esto último es sumamente interesante, ya que nos sugiere que bajo ciertas condiciones de campo es posible provocar atracción o repulsión en las paredes de la celda híbrida con sólo variar el flujo aplicado.

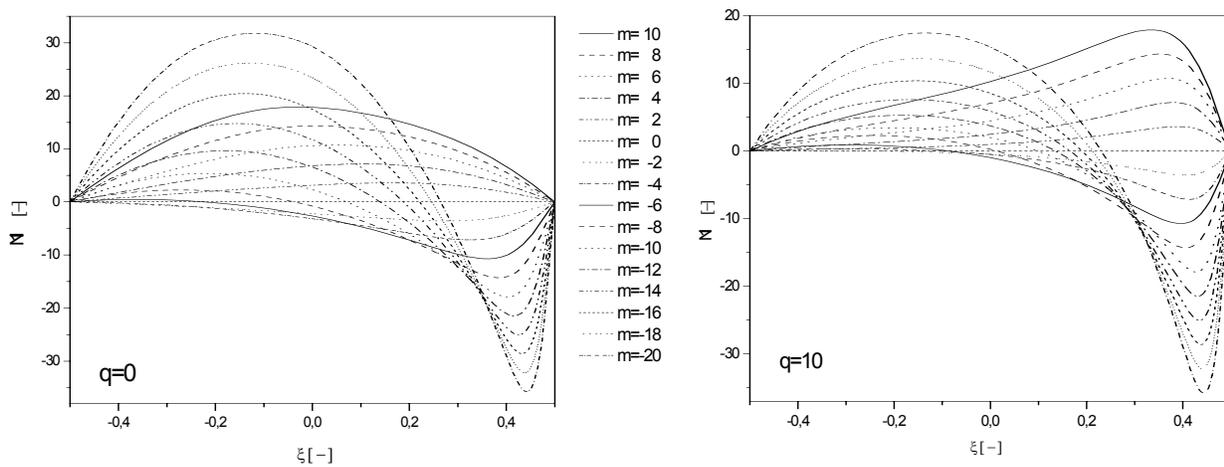


Fig. 4.20 Primera diferencia normal de esfuerzos vs espesor de la celda ($q=cte$).

4.3.6 Primera diferencia normal de esfuerzos promedio

La integral de la primera diferencia normal de esfuerzos, nos proporciona la dirección promedio (atracción o repulsión) de la fuerza normal aplicada sobre las placas que conforman la celda híbrida, esto es

$$\bar{N}_1 = \int_{-1/2}^{1/2} N_1 d\xi. \quad (4.25)$$

Al graficar la ec. (4.25) se obtienen los resultados expresados en la Fig. 4.21. Un valor positivo de \bar{N}_1 significa que existe una fuerza (debida al flujo) que tiende a separar las placas de la celda, valores negativos de \bar{N}_1 implica que la fuerza tiende a atraer las mismas.

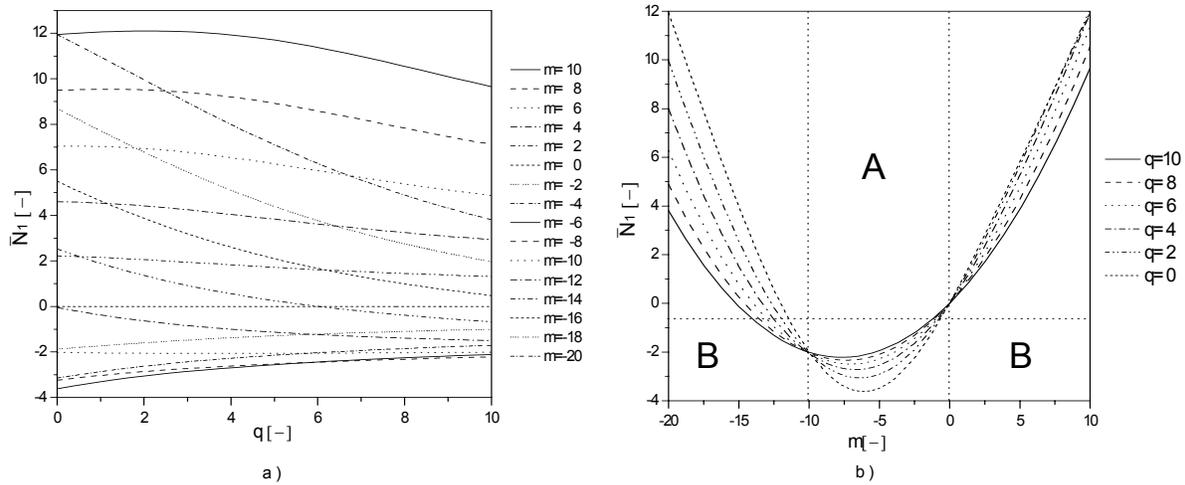


Fig. 4.21 Primera diferencia normal de esfuerzos vs; a) campo eléctrico, b) flujo cortante.

En la Fig. 4.21-a se aprecia que \bar{N}_1 es siempre positiva en flujos $m > 0$ sin importar el valor del campo aplicado, es siempre negativa en flujos negativos pequeños $m > -8$ y es positiva en flujos $m < -8$; además para todas las combinaciones de flujo y campo aplicados el valor mínimo de \bar{N}_1 resulta ser muy cercano a “-2.5” mientras que el valor máximo parece se incrementa indefinidamente.

Analizando la Fig. 4.21-b, se aprecian dos regiones importantes, en la primera (zona “A”) sólo existe atracción entre las placas de la celda y el efecto del campo implica que \bar{N}_1 decrezca y en consecuencia la atracción entre placas también lo hace. Por otra parte en la segunda región (zona “B”), existe atracción y repulsión, cuando se tiene atracción la aplicación del campo eléctrico propicia un aumento de esta, mientras que si se tiene repulsión surge el efecto contrario, el campo eléctrico disminuye dicha repulsión. Adicionalmente, también es posible observar que para la región de flujo $-15 < m < -10$ el campo gobierna el signo de \bar{N}_1 y con en consecuencia se puede controlar que exista atracción o repulsión entre las placas con sólo cambiar el valor del campo aplicado.



Finalmente es interesante resaltar que éstas regiones coinciden de manera exacta con las zonas donde se dan los fenómenos de *shear thinning* y *thickening* descritos en la sección 4.3.4; además en los puntos por los que son separadas dichas regiones ($m=0$, $m=-10$), las fuerzas de atracción y repulsión son nulas sin importar los valores de campo que se apliquen (Fig. 4.22).

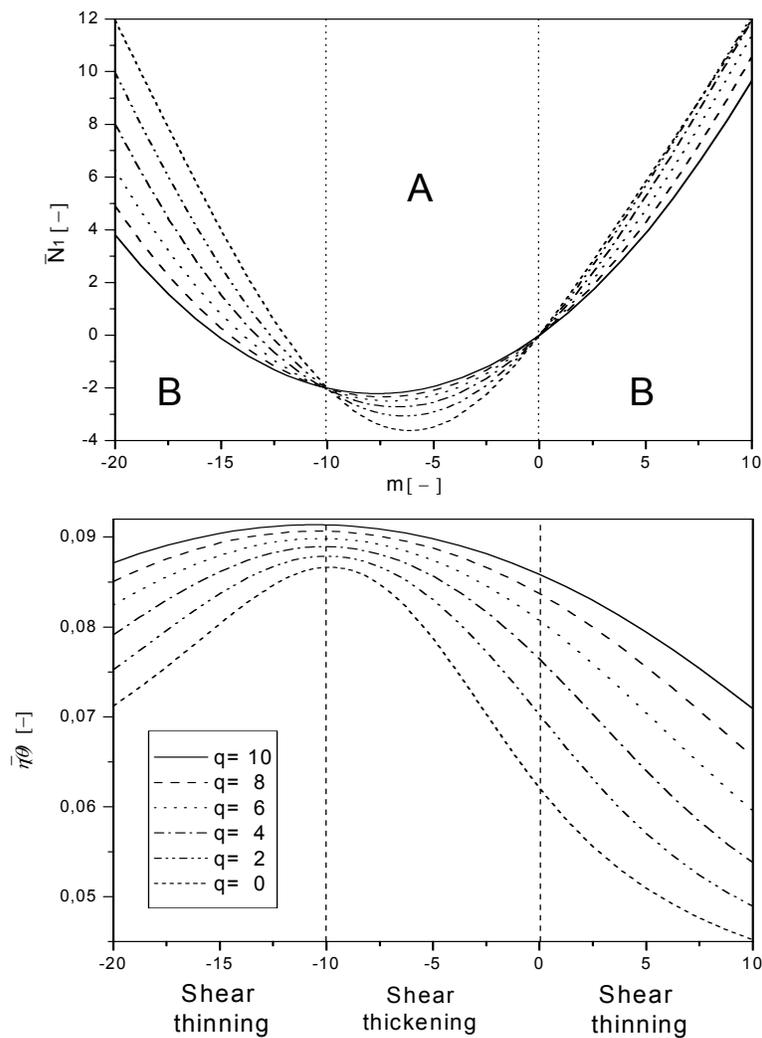


Fig. 4.21 Comparación entre la “Primera diferencia normal de esfuerzos” y la “Viscosidad promedio” del CL.



4.3.7 Esfuerzo cortante

De la ec. (4.1) es posible calcular el esfuerzo cortante σ_{xz} , el cual resulta ser:

$$\sigma_{xz} = \frac{1}{2} \frac{dv_x}{dz} [2\alpha_1 \sin^2 \theta \cos^2 \theta - \alpha_2 \cos^2 \theta + \alpha_3 \sin^2 \theta + (\alpha_5 + \alpha_6) \sin \theta \cos \theta]. \quad (4.26)$$

Al evaluar dicho esfuerzo en las paredes de la celda, se consigue determinar la expresión de la fuerza de arrastre superior (D_{sup}) e inferior (D_{inf}) por unidad de área que provoca el flujo nemático en las paredes de la celda, esto es:

$$\begin{aligned} D_{inf} &= -\sigma_{xz} \Big|_{\xi=-1/2} \\ &= -\frac{v_0}{2l} (\alpha_2) \frac{dv_x}{dz} \Big|_{\xi=1/2} \\ &= \frac{m\alpha_2}{\eta_c}, \end{aligned} \quad (4.27)$$

$$\begin{aligned} D_{sup} &= -\sigma_{xz} \Big|_{\xi=1/2} \\ &= -\frac{v_0}{2l} (\alpha_3) \frac{dv_x}{dz} \Big|_{\xi=1/2} \\ &= -\frac{m\alpha_3}{\eta_b}. \end{aligned} \quad (4.28)$$

De (4.27) y (4.28), obsérvese que las fuerzas de arrastre (D_{sup} y D_{inf}) se comportan de manera lineal con el flujo y parece ser que son independientes del valor de campo aplicado, sin embargo esto no es así ya que $m=m'C$ y C es una función del campo eléctrico.



CONCLUSIONES

En este trabajo se estudió un modelo hidrodinámico que describe el comportamiento de las moléculas de un cristal líquido nemático, confinado dentro de una celda híbrida y sujeto a la acción simultánea de un flujo cortante y un campo eléctrico perpendicular a las paredes de la celda.

El fundamento teórico de dicho modelo hidrodinámico se basa en la teoría nematodinámica de Ericksen-Leslie-Parodi. Con el fin de lograr un modelo práctico que no presentase complicaciones extremas para su solución numérica, se hicieron algunas consideraciones simplificadoras, de entre ellas que el CL se encuentra en equilibrio térmico, que las condiciones de frontera son siempre fijas y que las constantes elásticas del material son iguales.

Se resolvieron las ecuaciones diferenciales (orientación del director y perfil de velocidades) obtenidas del modelo mediante el procedimiento numérico “*shooting*” y se encontró que bajo diferentes valores de flujo y campo es posible propiciar una reorientación del director del nemático en sentido horario (cuando el flujo aplicado es positivo) o anti-horario (para flujo negativo), logrando con ello modificar y controlar las características de flujo no Newtoniano del CL.

Se comprobó que la viscosidad aparente del CL tiene una estrecha relación con la reorientación de las moléculas del mismo, la cual a su vez es función del campo eléctrico aplicado (efecto electro-reológico). Por otra parte se encontró que los valores calculados de la viscosidad aparente tienen como límite la orientación vertical de los coeficientes de Miesowicz η_c cuando el campo eléctrico es muy grande y el flujo pequeño y $\eta(\theta_{max})$ para campo eléctrico pequeño y flujo grande. En el caso particular del CL estudiado en este trabajo (5CB) el valor calculado de η_c es 0.1052 [Pa-s] y el valor $\eta(\theta_{max})$ es 0.0204 [Pa-s], por lo que el incremento de la



viscosidad puede ser tan grande como 500%. Este resultado es de suma importancia en múltiples aplicaciones de los CL's, por ejemplo en sistemas de amortiguamiento donde se usan CL's como fluido de trabajo, ya que en ellos es necesario conocer y controlar el comportamiento de la viscosidad del fluido dentro del amortiguador con el fin de regular el amortiguamiento.

Por otra parte, una de las características más interesantes encontradas en el sistema estudiado es la capacidad de controlar eléctricamente las propiedades reológicas del CL y con ello lograr que este actúe como un fluido dilatante o pseudoplástico presentando los fenómenos "*shear thickening*" y "*shear thinning*", respectivamente, bajo diferentes combinaciones de flujo y campo aplicados. Es importante destacar que ante la acción de un campo eléctrico intenso los efectos no Newtonianos se hacen menos evidentes. Estos resultados toman relevancia por ejemplo en sistemas de micro-canales con CL,s como fluidos de trabajo ya que, en ellos se requiere tener un control de la viscosidad y del comportamiento del fluido como función casi exclusivamente del flujo dentro de los canales; cabe señalar que esta es una de las aplicaciones exclusivas de los CL's ya que el uso de otros fluidos electro-reológicos coloidales esta restringido por su acción abrasiva y de obstrucción de los micro-canales.

En cuanto a la primera diferencia normal de esfuerzos, se ha encontrado que un flujo positivo propicia sólo valores positivos de la primera diferencia normal de esfuerzos, mientras que uno negativo puede generar valores positivos y negativos dependiendo del valor del campo eléctrico aplicado, esto quiere decir que un flujo positivo, siempre propicia repulsión entre las placas de la celda, mientras que en uno negativo es posible controlar el estado de repulsión o atracción entre la placas con sólo variar el valor del campo aplicado. Dichos resultados son de remarcado interés por ejemplo en sistemas de micro-válvulas de CL's, ya que aquí se requiere conocer el comportamiento exacto del CL ante diferentes valores de campo aplicado



CONCLUSIONES

para predecir su comportamiento y en consecuencia su manejo al imprimirles el campo eléctrico con el cual trabajan.

Como complemento a este trabajo resultaría interesante estudiar el comportamiento reológico de los CL's nemáticos tanto en el plano "x-z" como en el "y-z" o aplicar valores de campo y flujo mas amplios a los aquí utilizados.

Para estudios futuros es atrayente analizar las características de CL's dentro de celdas con otras geometrías como por ejemplo dentro de cilindros concéntricos combinándolo con diferentes tipos de flujo como flujos oscilantes, de Poiseuille o de Couette. También es interesante estudiar el comportamiento físico de los sistemas desistiendo de usar las simplificaciones hechas para este trabajo como considerar la posibilidad de un anclaje débil entre las moléculas y las paredes de la celda o asumir que las constante elásticas de Frank no son iguales $K_1 \neq K_2 \neq K_3$. Adicionalmente, seria interesante analizar diferentes combinaciones de efectos externos tales como la aplicación simultánea de un campo eléctrico y uno magnético o estudiar el comportamiento del sistema cuando aún no ha alcanzado el estado estacionario (comportamiento dinámico).



BIBLIOGRAFÍA

1. HAKOGI, Hokuto; OHADA, Motoyashy; et al. "Torque Control of a Rehabilitation Teaching Robot Using Magneto-Reological Fluid Clutches". *Journal Society of Mechanical Engineers*. Vol.48. No.3 (2005), pp. 501-507.
2. CUPICH, R. Miguel; ELIZONDO, Fernando. "Amortiguadores Magnetoreológicos". *Ingenierías*. Vol.1. No.2 (1998), pp. 50-54.
3. KORDONSKY, W; et al. "Magnetorheological Effect as a Base of New Devices and Technologies". *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*. Vol.122. (1993), pp. 395-98.
4. REJÓN, Leonardo; LÓPEZ, Francisco G.; et al. "Fluidos electrorreológicos". *Boletín Instituto de Investigaciones Eléctricas*, Vol.27. No.1 (2003), pp. 26-30.
5. TSIKIJU, Tetsuhiro; KOYABU, Eitaro; et al. "Influence of Electric Field on the Flow of a Liquid Crystals Mixture in Circular-Pipe Electrodes". *Journal Society of Mechanical Engineers*. Vol.48. No.3 (2005), pp. 517-523.
6. REYES, Adrián; MANERO, Octavio; et al. "Electrorheology of nematic liquid crystals in uniform shear flow". *Rheological Acta*. Vol.5. No.40 (2001), pp. 426-433.
7. YOSHUDA K.; YOKOTA S.; et al. "The use of liquid crystals as electrorheological fluids in microsystems: model and measurements". *Journal Micromechanics and Microengineering*. Vol. 16. (2006), pp. 612-619.
8. NAKANO, Masami; SUGAMATA, Yoshitake; et al. "Dynamic Shear Flow Behavior of Magneto-Rheological Fluid between two Rotating Parallel Disks under Relatively Weak Magnetic Field". *Japan Society of Mechanical Engineers (Serie B)*. Vol.48, No.3 (2005), pp. 494-500.
9. DAOUD, Mohamed; WILLIAMS, Claudine. "Soft Matter Physics". Berlin: Springer-Verlag, 1999.
10. DUMAR, A. David. "Liquid Crystals: Fundamentals". London: World Scientific, 2002.



11. COLLINGS, Peter; HIRD, Michael. "Introducción to Liquid Crystals". London: Taylor and Francis, 1998. (The Liquid Crystals book series)
12. BROWN, Glenn H; WOLKEN, J.J. "Liquid Crystals and Biological Structures". N.Y. USA: Academic Press, 1979.
13. GARCIA, C. Leopoldo; RODRÍGUEZ, Z. R. "Líquidos Exóticos". 2a ed. México: FCE, 2001. (La ciencia para todos; 104).
14. KOO. I. C. "Liquid Crystals, Physical Properties and Nonlinear Optical Phenomena". New York: Jhon Wiley, 1995.
15. BAHADUR, B. "Liquid Crystal: Application and Uses". Vol 1. Singapur: World Scientific, 1990.
16. JONES, A. L. Richard. "Soft Condensed Matter". Gran Bretaña: Oxford, 2002.
17. SOLTERO, M. Félix Armando. "Relación entre estructuras y propiedades reológicas de Cristales Líquidos Liotrópicos y Poliméricos", Tesis Doctorado. México: Universidad Nacional Autónoma de México, 1995.
18. ORTEGA BERNAL, Ma. del Pilar. "Estructura transitoria en Cristales Líquidos Nemáticos", Tesis Maestría. México: Universidad Nacional Autónoma de México, 1991.
19. BLINOV, L.; CARRAHER C. et. al. "Cristales Líquidos", Ed. Mir Moscú, URSS, 1985.
20. TIMOSHENKO, S. P. "Elementos de resistencia de materiales". México: Limusa, 1996.
21. YUNG, Donald F; OKIISHI H. Theodore; et. al. "Fundamentals of Fluid Mechanics" 3ra ed, USA: John Wuley and Sons, Inc., 1998.
22. POTTER, Merle C. y FOSS, F. John. "Fluid Mechanics", USA: Prentice Hall, 1995.
23. WHITE, M. Frank. "Mecánica de Fluidos", 5º ed, España: Mc Graw Hill, 2004.
24. MASSEY, Bernard S. "Mecánica de Fluidos". México: Compañía Editorial Continental, 1979.
25. LEVI, Enzo. "Elementos de Mecánica del Medio Continuo". México: Limusa-Wiley, 1971.



26. LAI, W. Michael. "Introduction to Continuum Mechanics". 3^a ed, Great Britain: Pergamon Press, 1993.
27. MORRISON, Faith A., "Understanding Rheology" New York: Oxford University Press, 2001.
28. KLEMAN, Maurice. "Soft Matter Physics" New York: Springer, 2003.
29. STEWART, W. Ian, "The static and dynamic continuum theory of Liquid Crystals". USA: Taylor and Francis, 2004.
30. MANERO, Octavio; REYES, Adrián; et al. "Model for the electrorheological effect in flowing polymeric nematics". *Journal of Chemical Physics*. Vol. 110. No.16 (1999) pp. 8197-8204.
31. DEMUS D. "Handbook of Liquid Crystals, Fundamentals Vol 1". Germany: Weinheim, 1998.
32. NAGLE, R. Kent; SAFE, B. Edward et al. "Fundamentals of Differential Equations and Boundary Value Problems". 3^o ed. USA: Addison Wesley 2000.
33. CHANDRASEKHAR, Sivaramakrishna. "Liquid Crystals". 2^o ed, USA: Cambridge University Press, 1992.
34. DUNMUR, D. A., FUKUDA A., LUCKHURST G. R. "Physical Properties of Liquid Crystals Nematics". England: INSPEC, 2001.