



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO

FACULTAD DE ESTUDIOS SUPERIORES ZARAGOZA

**“COMPORTAMIENTO NO NEWTONIANO Y
EFECTO ELECTRO-REOLÓGICO EN UNA CELDA
HOMOGÉNEA DE CRISTAL LÍQUIDO NEMÁTICO
BAJO UN ESFUERZO CORTANTE”**

T E S I S

QUE PARA OBTENER EL TÍTULO DE:

INGENIERO QUÍMICO

P R E S E N T A:

JUAN CARLOS MEDINA ÁLVAREZ

DIRECTOR: DR. CARLOS IGNACIO MENDOZA RUIZ



2007



Universidad Nacional
Autónoma de México



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.



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO
FACULTAD DE ESTUDIOS SUPERIORES
ZARAGOZA
JEFATURA DE LA CARRERA DE INGENIERÍA
QUÍMICA

OFICIO: FESZ/JCIQ/032/07

ASUNTO: Asignación de Jurado

ALUMNO: MEDINA ÁLVAREZ JUAN CARLOS
P R E S E N T E

En respuesta a su solicitud de asignación de jurado, la jefatura a mi cargo, ha propuesto a los siguientes sinodales:

PRESIDENTE	I. Q. Eduardo Vázquez Zamora
VOCAL	Dr. Carlos Ignacio Mendoza Ruiz
SECRETARIO	Dr. Roberto Mendoza Serna
SUPLENTE	M. en C. Javier Hernández Aguilar
SUPLENTE	Dr. Juan Adrián Reyes Cervantes

Sin más por el momento, reciba un cordial saludo.

A T E N T A M E N T E
“POR MI RAZA HABLARÁ EL ESPÍRITU”

México D. F., a 27 de Agosto de 2007

JEFE DE LA CARRERA


I. Q. RAÚL RAMÓN MORA HERNÁNDEZ



*Dedico esta tesis a la
Memoria de mi Madre*

AGRADECIMIENTOS

Agradezco a Dios por brindarme la oportunidad de llegar hasta esta instancia y darme la fuerza para poder seguir adelante en los momentos difíciles de mi vida.

Agradezco infinitamente a mis padres quines fueron los que me dieron la vida, en especial a mi Madre a quien le toco ser mamá y papá para mí, brindándome su amor y su apoyo incondicional. Muchas gracias mamá porque se que aunque ya no estas conmigo desde donde quiera que te encuentres me sigues ayudando en todo lo que hago, así que cada logro mío es logro tuyo también.

A todos mis hermanos en especial a Patricia quien es la cabeza de la familia, ya que han estado ahí cuando los he necesitado, siendo así una pieza fundamental en la realización de este logro.

A mi director Dr. Carlos Ignacio Mendoza Ruiz, muchas gracias por su paciencia, dedicación y apoyo en la realización de este trabajo, fue un gusto el haber podido trabajar con usted, aprendí muchísimas cosas. Es un gran profesional pero sobre todo una gran persona, siempre tendrá mi admiración y respeto.

Agradezco a la Universidad Nacional Autónoma de México, por haber sido mi casa durante tanto tiempo, al Instituto de Investigaciones en Materiales por haberme apoyado con una beca para la realización de esta tesis de licenciatura, así como también agradezco el apoyo económico recibido a través del proyecto DGAPA PAPIIT No. IN107607.

A todos los que fueron mis profesores en la Facultad de Estudios Superiores Zaragoza, gracias por transmitirme sus conocimientos, anécdotas y consejos fue una experiencia muy enriquecedora haberlos conocido.

Agradezco a todos mis sinodales, por su revisión y recomendaciones las cuales fueron de gran ayuda para el mejoramiento de este trabajo.

A todos mis amigos de la carrera, Rodolfo, Alan, Alfonso, Héctor y Samanta, con quienes pase momentos inolvidables y son personas muy importantes en mi vida.

A mi primo Fernando quien es como un hermano para mí, con quien he pasado alegrías y tristezas, gracias por tu apoyo y comprensión.

INDICE DE FIGURAS.....	6
RESUMEN.....	8
INTRODUCCIÓN.....	9
CAPÍTULO 1. GENERALIDADES.....	11
1.1. RESEÑA HISTORICA.....	11
1.2. CRISTALES LÍQUIDOS.....	12
1.3. CLASIFICACIÓN DE LOS CRISTALES LÍQUIDOS.....	15
1.3.1. Clasificación de acuerdo a la geometría de las moléculas.....	15
1.3.2. Clasificación de acuerdo al modo de formación.....	17
1.3.3. Clasificación de acuerdo al tipo de arreglo molecular.....	17
1.4. ESTRUCTURA QUÍMICA DE LOS CRISTALES LÍQUIDOS.....	20
1.5. CONSTANTES FÍSICAS DEL 5CB.....	22
1.6. INTERACCIÓN DE LOS CRISTALES LÍQUIDOS CON SUPERFICIES.....	23
1.7. CONSTANTES ELÁSTICAS DE UN CRISTAL LÍQUIDO NEMÁTICO.....	26
1.8. RESPUESTA DE UN CRISTAL LÍQUIDO NEMÁTICO A UN CAMPO ELÉCTRICO.....	28
1.9. LA TRANSICIÓN DE FREEDERICKSZ.....	32
CAPÍTULO 2. HIDRODINÁMICA DE CRISTALES LÍQUIDOS.....	34
2.1. VISCOSIDAD ABSOLUTA.....	34
2.2. FLUIDOS NEWTONIANOS Y FLUIDOS NO – NEWTONIANOS.....	36
2.3. FLUIDOS PSEUDOPLASTICOS Y FLUIDOS DILATANTES.....	37
2.4. TENSOR DE ESFUERZOS.....	38
2.6. LA TEORÍA DEL CONTINUO PARA EL ESTADO NEMÁTICO (NEMATODINÁMICA).....	41
2.7. COEFICIENTES DE LESLIE.....	46
2.8. VISCOSIDADES DE MIESOWICZ.....	47
CAPÍTULO 3. HIDRODINÁMICA DE UNA CELDA PLANAR – PLANAR DE CRISTAL LÍQUIDO NEMÁTICO.....	48
3.1. MODELO DE LA CELDA PLANAR – PLANAR.....	49
3.2. ECUACIONES Y MODELOS GOBERNANTES.....	50
3.2.1 Torque debido al flujo de corte aplicado.....	51
3.2.2 Torque en la molécula debido al campo eléctrico.....	52
3.2.3 Torque en la molécula debido a las propiedades elásticas.....	53
3.2.4 Torque dinámico.....	54
3.2.5 Equilibrio de la suma de torques.....	54
3.3. DEDUCCIÓN DE LA ECUACIÓN DE CONSERVACIÓN DEL MOMENTO LINEAL.....	55
3.4. MÉTODO DE SOLUCIÓN.....	58
3.5. DESCRIPCIÓN DEL MÉTODO NUMÉRICO A UTILIZAR (“SHOOTING”).....	61
CAPÍTULO 4. RESULTADOS.....	64
4.1. CONFIGURACIÓN DEL DIRECTOR DEL NEMÁTICO.....	66
4.2. PERFIL DE VELOCIDADES.....	69
4.3. VISCOSIDAD.....	73
4.4. ESFUERZOS DE CORTE.....	79
CAPÍTULO 5. CONCLUSIONES.....	81
BIBLIOGRAFÍA.....	84

INDICE DE FIGURAS

Figura.1.1. Representación de las fases sólida, líquido – cristalina y líquida.....	13
Figura.1.2. Formas más comunes de las moléculas de cristales líquidos.....	14
Figura.1.3. Conjunto de moléculas de cristal líquido con una misma orientación promedio.....	14
Figura.1.4. Esquema de la clasificación de los cristales líquidos.....	15
Figura.1.5. Molécula típica de un cristal líquido calamítico.....	16
Figura.1.6. Molécula típica de un cristal líquido discótico.....	16
Figura.1.7. Estructuras moleculares en forma de V, denominados compuestos banana.....	17
Figura.1.8. Representación de la fase nemática.....	18
Figura.1.9. Representación de la fase esméctica.....	19
Figura.1.10. Representación de la fase colestérica.....	20
Figura.1.11. Estructura química de una molécula de cristal líquido.....	20
Figura.1.12 Estructura química del cristal líquido 4'-n-pentil-4-cianobifenil (5CB)...	22
Figura.1.13. Las moléculas de los surfactantes hacen que el nemático se oriente verticalmente a la placa.....	24
Figura. 1.14. Disposición de las moléculas en una superficie pulida.....	25
Figura.1.15. Tipos básicos de deformación en cristales líquidos nemáticos.....	27
Figura.1.16. Orientación de un dipolo eléctrico, debido a un campo eléctrico.....	29
Figura 1.17. Anisotropía dieléctrica en un cristal líquido nemático, en el cual existe un dipolo permanente paralelo al eje longitudinal de la molécula. En ausencia de campo eléctrico (izquierda), no hay un momento bipolar neto. Si el campo es aplicado paralelamente al director (dibujo superior derecho), es relativamente fácil obtener un dipolo grande inducido, mientras que si el campo es perpendicular al director (dibujo inferior derecho) el grado de polarización es mas pequeño.....	31
Figura.1.18. Transición de Freedericksz, para un alineamiento molecular homogéneo.....	33
Figura 2.1. Formación del perfil de velocidad en estado estacionario para un fluido contenido entre dos placas.....	35
Figura 2.2 Variación lineal del esfuerzo cortante vs el gradiente de velocidad....	37
Figura 2.3. Viscosidad a) esfuerzo en función del gradiente de velocidad; b) efecto del tiempo sobre el esfuerzo de corte aplicado.....	38
Figura 2.4. Definición de esfuerzo en un punto “P” de área Δs que transmite una fuerza ΔF	39

Figura 2.5. Cubo de material infinitesimal que muestra los nueve componentes del tensor esfuerzo.....	40
Figura 2.8. Cualquier deformación se puede representar tomando en cuenta dos componentes, uno asociado con un cambio de forma (a), el otro con una rotación (b). La suma neta de estos dos convierte a un cuadrado en un rombo girado.....	45
Figura 2.9. La combinación de flujo rotacional y flujo no-rotacional producen un flujo de corte.....	45
Figura 2.10. Torques viscosos actuando en el campo director en tres geometrías diferentes.....	46
Figura 2.11. Geometrías de Miesowicz: (a) n paralelo al plano y, (b) n paralelo al flujo, (c) n paralelo al gradiente de velocidad.....	47
Figura.3.1 Representación de una celda de cristal liquido nemático planar – planar.	50
Figura3.2. Torque en el nemático producto del flujo de corte.....	52
Figura 3.3 Torque en el nemático producto de un campo eléctrico.....	53
Figura 3.4 Solución por método “shooting” de un problema con condiciones de frontera.....	62
Figura 4.1 Gráfica de “ β ” vs “ θ ($z=1/2$)= 90° ” con una sola raíz.....	64
Figura 4.2 Gráfica de “ β ” vs “ θ ($z=1/2$)= 90° ” con 2 raíces.....	64
Figura 4.3 Gráfica de “ β ” vs “ θ ($z=1/2$)= 90° ” con tres raíces.....	65
Figura 4.4. Diagrama de fases para nuestro problema.....	65
Figura 4.5. Orientación del director para diferentes valores de m con q fija.....	67
Figura 4.6. Orientación del director para diferentes valores de q con m fija.....	68
Figura 4.7. Orientación del director para valores de m negativos.....	70
Figura 4.8. Perfil de velocidad para valores de m positivos.....	71
Figura 4.9. Perfil de velocidad para valores de m negativos.....	72
Figura 4.10. Viscosidad local para valores de m positivos.....	74
Figura 4.11. Viscosidad local para valores de m negativos.....	76
Figura 4.12. Viscosidad promedio como función de (a) q y (b) m.....	78

RESUMEN

En este trabajo de tesis se estudió un modelo hidrodinámico para describir el flujo de un cristal líquido nemático, calamítico, termotrópico (5CB) confinado en una celda rectangular homogénea bajo la acción simultánea de un campo eléctrico y un flujo cortante. Se resolvió numéricamente las ecuaciones nematodinámicas del sistema y se mostró la existencia de un diagrama de fases en el plano de flujo vs campo eléctrico que separa zonas en donde la configuración estacionaria del sistema es única de otra en donde existen configuraciones múltiples. En el caso de campo eléctrico cero la transición de fase se reduce a la transición de Fredericks. Adicionalmente se calculó el campo de velocidades y las funciones viscométricas del sistema. Se encontró un efecto electro-reológico importante y el comportamiento no Newtoniano del sistema muestra zonas de "shear-thickening" y "shear-thinning", además se observó que bajo la acción del campo eléctrico el comportamiento no Newtoniano es menos notorio.

INTRODUCCIÓN

Los cristales líquidos son sustancias que cuando llegan a un cierto intervalo de temperatura poseen la particularidad de exhibir propiedades físicas de la fase sólida y líquida simultáneamente. Asimismo estos líquidos tan peculiares presentan la capacidad de poder cambiar sus propiedades físicas (rigidez, viscosidad, forma, color, configuración interna etc.) en presencia de un estímulo externo como campos eléctricos, magnéticos o variación de la temperatura. Por todo lo anterior se les ha estudiado extensivamente. El hecho de que sus moléculas tiendan a orientarse respecto a cierta dirección (como ocurre en la fase sólida), lo que se conoce como orden orientacional, pero que además éstas no se encuentren fijas en una posición (orden posicional), sino que, al igual que en la fase líquida sus moléculas tienen cierta libertad para moverse en el medio, los hace unos materiales con un campo de aplicación bastante amplio en nuestros días.

Durante las últimas décadas, a los cristales líquidos se les han encontrado una amplia gama de aplicaciones como por ejemplo, las bien conocidas pantallas de cristal líquido, termómetros de cristal líquido, ventanas capaces de obscurecerse o aclararse según se requiera, lentes enfocadores electro-ópticos y muchos otros innovadores productos. Cabe mencionar que aunque las propiedades ópticas de los cristales líquidos son las de mayor auge en lo que aplicaciones se refiere, en los últimos años los cristales líquidos son usados como fluidos en los cuales puede controlarse su viscosidad aparente mediante un campo eléctrico, este fenómeno es conocido como efecto electro-reológico y resulta ser muy útil para diversas aplicaciones industriales, además el hecho de que estos líquidos exóticos no contienen partículas suspendidas, permite un buen desempeño de estos materiales en microsistemas.

Para poder encontrar mas aplicaciones prácticas de estas sustancias es preciso estudiar y entender el comportamiento de sus propiedades físicas, así como aprender a manipularlas y controlarlas, de esta manera podremos emplearlas de una manera eficiente en diferentes ámbitos de la vida cotidiana. Por otro lado, aunque sabemos que los intentos para entender el comportamiento detallado de las propiedades de estos materiales, han sido numerosos, falta mucho por hacer ya que aun se desconocen varios aspectos referentes a la influencia que tienen la variación de temperatura, los campos eléctricos y magnéticos sobre los cristales líquidos, así como su comportamiento reológico en distintas condiciones de flujo.

Teniendo en cuenta todo lo anterior, este trabajo de tesis tiene como objetivo estudiar las propiedades reológicas del cristal líquido nemático (5CB), el cual está confinado entre dos placas de vidrio previamente tratadas para que las moléculas del material adopten una alineación homogénea (es decir, alineamiento paralelo a la placa) en ambas placas, además el cristal líquido estará simultáneamente influenciado por un campo eléctrico y un flujo de corte.

Esta tesis está organizada como sigue: en el capítulo 1 hablaremos un poco de la evolución que han tenido los cristales líquidos desde su descubrimiento y discutiremos un poco sobre aspectos físicos y químicos fundamentales de estos materiales como son la naturaleza de sus propiedades elásticas y su estructura química, haciendo un especial énfasis hacia los del tipo nemático que son los de particular interés en éste trabajo. En el capítulo 2 trataremos la hidrodinámica de los cristales líquidos, manejando la nematodinámica de Eriksen, Leslie y Parodi, así como los coeficientes de Miesowicz. En el capítulo 3 presentaremos las ecuaciones que gobiernan el sistema de interés y la metodología que se seguirá para la resolución del mismo. En el capítulo 4 expondremos los resultados obtenidos, y el capítulo 5 lo dedicaremos a las conclusiones de nuestro trabajo.

CAPÍTULO 1. GENERALIDADES

Para estudiar a los cristales líquidos, primero tenemos que saber que son y cómo se comportan estos materiales, es por eso que en este primer capítulo nos dedicaremos a hablar de su descubrimiento, aplicaciones, clasificación, y estructura química, así como también de sus respuestas a factores externos como lo puede ser un campo eléctrico o alguna superficie de contacto, además tocaremos algunos aspectos físicos, como lo son las deformaciones elásticas que sufren estos fluidos exóticos. Este capítulo nos dará las bases para entender muchos fenómenos que se dan en los cristales líquidos y nos ayudará a comprender porqué en la actualidad son tan ampliamente estudiados.

1.1. RESEÑA HISTORICA

El descubrimiento de los cristales líquidos es atribuido a un Botánico Australiano llamado Friedrich Reinitzer. En 1888, él experimentó con una sustancia relacionada al colesterol y notó que tenía dos puntos de fusión, a 145.5 °C pasaba de un sólido a un líquido turbio y a 178.5 °C el líquido se volvía más claro, casi transparente [1]. Además observó un comportamiento inusual en el color del fluido al enfriarse; primero aparecía un color azul pálido cuando el líquido claro pasa a turbio y después un azul – violeta brillante se presentaba en el líquido turbio cristalizado. Reinitzer envió sus muestras de la sustancia a Otto Lehmann, un profesor de filosofía natural (Física) en Alemania. Lehmann era un estudioso de las propiedades de cristalización de varias sustancias y Reinitzer se preguntaba si lo que observaba estaba relacionado con lo que Lehmann estaba reportando. Lehmann tuvo que construir un microscopio polarizador de una etapa con el cual podría controlar con precisión la temperatura de sus pruebas [2]. Este instrumento le permitió observar la cristalización de sus pruebas bajo condiciones controladas.

Lehmann observó la sustancia de Reinitzer con su microscopio y notó su semejanza con algunas de sus propias pruebas, él primero se refirió a ellas como cristales blandos, después uso el término de fluidos cristalinos. Posteriormente como llegó a estar más convencido de que la fase opaca era una fase uniforme de la materia que compartía propiedades de los líquidos y sólidos, los llamo cristales líquidos [2]. Lehmann al continuar con la investigación de estas sustancias, notó que

algunos cristales líquidos se comportaban de diferente manera que otros, y trató de describirlos pero nunca llegó a una clasificación de éstos. Fue hasta 1922 cuando Georges Friedel clasificó a los cristales líquidos en nemáticos, esmécticos y colestéricos [3]. Otra aportación significativa de Lehmann sobre estos fluidos, fue el hecho de descubrir que una superficie sólida en contacto con una sustancia líquido cristalina causa que sus moléculas se orienten en cierta dirección, esta idea fue de suma importancia para años posteriores en los cuales varios científicos empezaron a experimentar con pantallas de cristal líquido.

A pesar de que inicialmente los cristales líquidos despertaron gran interés y fueron muy estudiados durante el primer tercio del siglo pasado, pronto fueron relegados a un rincón de la física y cayeron rápidamente en el olvido como curiosidad de laboratorio [3]. Fue hasta la década de los 60's del siglo pasado, cuando se despertó nuevamente el interés en los cristales líquidos y sentaron las bases para la aplicación de estas sustancias en el campo de la visualización de imágenes.

En los últimos treinta años se ha encontrado que estas sustancias ocupan un lugar único en la naturaleza ya que desempeñan un papel fundamental en los organismos vivos, por ejemplo, el ADN forma diversas fases líquido-cristalinas [4]. Por otro lado, tecnológicamente, los cristales líquidos han llegado a ser una parte de nuestra vida diaria, primero apareciendo en relojes de pulsera y calculadoras de bolsillo, pero ahora han sido utilizados para las pantallas de todo tipo de instrumentos, incluyendo computadoras portátiles y televisiones. Sus ventajas primero fueron su bajo consumo de energía y su tamaño pequeño, ahora las pantallas de cristal líquido compiten con otras tecnologías por atractivas, por su bajo nivel de emisiones, por su costo y su durabilidad [5].

1.2. CRISTALES LÍQUIDOS

La mayoría de los materiales sólidos al fundirse dan lugar directamente a líquidos isotrópicos. Sin embargo, en algunos casos, se forman una o más fases intermedias, denominadas mesofases, donde el material tiene una estructura ordenada y al mismo tiempo la movilidad propia de un líquido. Los compuestos que tienen esta característica se denominan cristales líquidos (o mesógenos) [2].

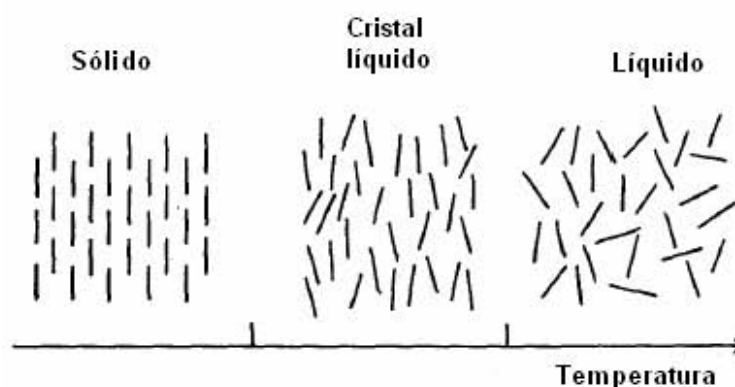


Figura.1.1. Representación de las fases sólida, líquido – cristalina y líquida.

Por una parte llamamos líquido a una sustancia que fluye y toma la forma del recipiente que la contiene; pero, por otra, a un cristal lo concebimos como sustancia sólida y rígida. De modo que, al menos intuitivamente, un cristal es precisamente lo opuesto a un líquido. Y sin embargo existen sustancias reales, los cristales líquidos, que exhiben la dualidad sólido-líquido, es decir, que simultáneamente, poseen propiedades de los líquidos, fluidez y viscosidad, y propiedades ópticas que se parecen de modo asombroso a las de los cristales como, por ejemplo, poder reflejar colores diferentes dependiendo del ángulo bajo el cual se les observe.

Los cristales líquidos son anisotrópicos debido a su orden molecular. Los materiales anisotrópicos tienen propiedades que dependen de la dirección en que se miden. Por ejemplo, la viscosidad de estos compuestos es menor en la dirección paralela a las moléculas. Estas moléculas grandes y alargadas (2 nm de longitud por 0.5 nm de ancho) necesitan menos energía para deslizarse unas respecto a las otras a lo largo de sus ejes que para moverse lateralmente [6].

Los materiales isotrópicos como los líquidos normales son materiales cuyas propiedades no dependen de la dirección en que se miden. Por ejemplo, su viscosidad es la misma en cualquier dirección. Los cristales líquidos se convierten en líquidos isotrópicos 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 y romper el orden orientacional de las mismas.

Un cristal líquido fluye, se escurre y toma la forma del recipiente que lo contiene, de la misma manera que lo hace un líquido ordinario como, por ejemplo, el agua. Pero a diferencia de ésta, cuyas moléculas son

relativamente simples y prácticamente esféricas, las moléculas de un cristal líquido son, por lo general, o muy alargadas en forma de barra o aplanadas en forma de disco (tamaños típicos promedio de 2nm x 0.5 nm), como se puede observar en la siguiente ilustración [3]:

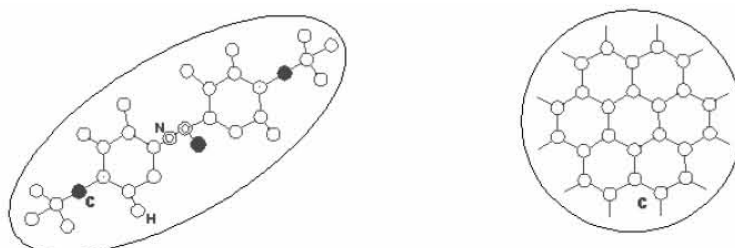


Figura. 1.2. Formas más comunes de las moléculas de cristales líquidos.

Debido a la estructura de sus moléculas y en especial debido a la asimetría de las mismas, un cristal líquido adopta configuraciones altamente ordenadas. Aunque el mecanismo de interacción molecular para estos fluidos exóticos es básicamente el mismo que genera el orden en los cristales sólidos. No debe olvidarse una diferencia esencial entre ambos sistemas: en todo momento los cristales líquidos permanecen en estado líquido, lo cual implica que los centros de masa de sus moléculas no forman una red periódica sino que fluyen manteniendo el orden en la orientación común de sus ejes moleculares.

En la mayoría de las fases de cristales líquidos las moléculas están, en promedio, orientadas hacia una dirección en particular llamada el **"director"** y es representado con el vector unitario n , esto se aprecia mejor en la siguiente figura:

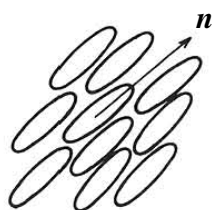


Figura. 1.3. Conjunto de moléculas de cristal líquido con una misma orientación promedio.

El hecho de que las moléculas de los cristales líquidos estén orientadas en promedio a lo largo de una cierta dirección en el espacio se conoce como *anisotropía* (por esta razón los cristales líquidos son fases anisotrópicas como se mencionó anteriormente) y tiene un profundo

efecto sobre sus propiedades. Es precisamente este ordenamiento lo que hace que los cristales líquidos se comporten un poco como líquidos y un poco como sólidos cristalinos, y no ser ni una cosa ni la otra independientemente.

1.3. CLASIFICACIÓN DE LOS CRISTALES LÍQUIDOS

Cabe mencionar que existe una gran gama de clasificaciones para los cristales líquidos, sin embargo, a continuación se presenta una clasificación general que está hecha considerando los aspectos más importantes para estas sustancias.

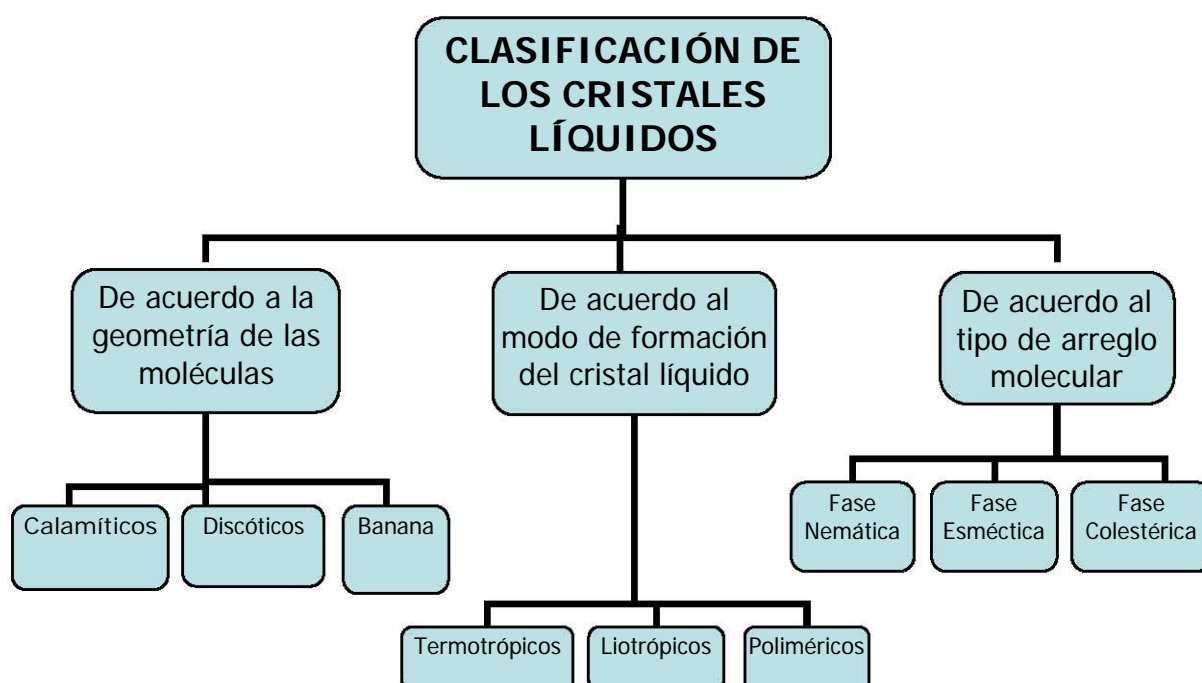


Figura. 1.4. Esquema de la clasificación de los cristales líquidos.

1.3.1. Clasificación de acuerdo a la geometría de las moléculas

Considerando la estructura geométrica de las moléculas mesogénicas, los cristales líquidos pueden ser agrupados en varios tipos. Los cristales líquidos derivados de las moléculas en forma de "barra" (es decir, un eje es mucho más largo que los otros dos)¹ son llamados "**calamíticos**".

¹ Es importante aclarar que la rigidez de las moléculas juegan un papel muy importante, de lo contrario podríamos decir que un polímero es un cristal líquido.

Esta clase de materiales es extremadamente usada en aplicaciones prácticas [6].

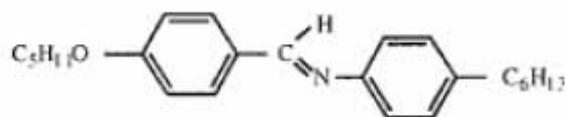


Figura. 1.5. Molécula típica de un cristal líquido calamítico.

Las mesofases formadas con moléculas en forma de discos (es decir, un eje molecular es mucho más corto que los otros dos, 2 nm de diámetro por 0.5 nm de ancho) son llamadas "**discóticas**" [6].

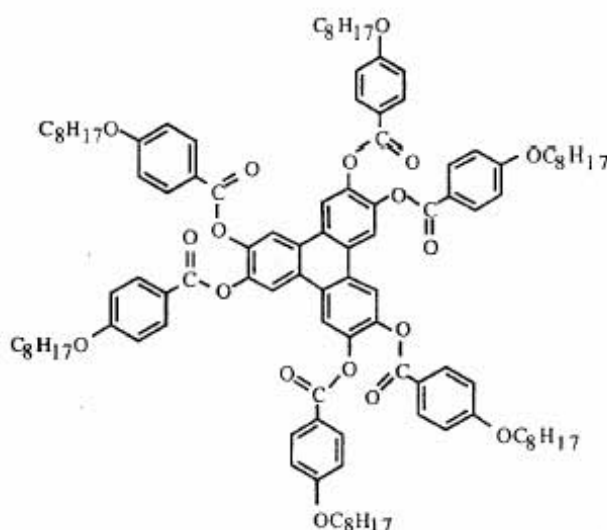


Figura. 1.6. Molécula típica de un cristal líquido discótico.

También existen un tipo de estructuras moleculares en forma de "V", los denominados compuestos "**banana**". Estas estructuras, por su particular geometría, permiten obtener empaquetamientos mesomorfos distintos a los descritos clásicamente, entre los cuales, y debido a la restricción de giros moleculares, algunos proporcionan ordenaciones altamente polares y no centrosimétricas incluso en ausencia de quiralidad (propiedad de un objeto de no ser superponible con su [imagen especular](#)) [2]. Las moléculas usualmente denominadas "banana" presentan una topología de diagrama de fases bastante interesante, estudios de sus propiedades eletro-ópticas han revelado que sus mesofases funcionan como superconductores en altas temperaturas.

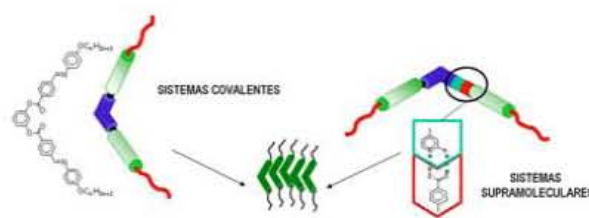


Figura 1.7. Estructuras moleculares en forma de V, denominados compuestos banana.

1.3.2. Clasificación de acuerdo al modo de formación

Los cristales líquidos se pueden clasificar también según su modo de formación. Así, aquellos que se forman por fusión de la fase sólida, se denominan **cristales líquidos termotrópicos** y pueden mostrar diferentes temperaturas de transición entre fases: transiciones cristal-cristal, punto de fusión (desde el sólido a la primera mesofase), mesofase-mesofase (cuando existen diferentes mesofases) y punto de aclaramiento (el cual se define como la temperatura a la que la última mesofase del cristal líquido se transforma en un líquido isotrópico) [6]. En general, estas transiciones se observan tanto al calentar la muestra como al enfriarla, cuando ocurre esto estamos hablando de transiciones enantiotrópicas, pero en algunos casos dichas transiciones sólo se observan al enfriar la muestra, entonces nos estamos refiriendo a transiciones monotrópicas.

Los **cristales líquidos liotrópicos** son aquellos que se forman al destruir la red cristalina del compuesto por adición de un disolvente [6]. Estos compuestos presentan mesofases que dependen de la temperatura y de la concentración.

Existen también cristales líquidos que se derivan de ciertas macromoléculas (por ejemplo largas cadenas de polímeros) usualmente en solución pero algunas veces hasta en su estado puro, éstos son conocidos como "**cristales líquidos poliméricos**".

1.3.3. Clasificación de acuerdo al tipo de arreglo molecular

De acuerdo con el tipo de arreglos moleculares que pueden formar los cristales líquidos se clasifican en tres grandes clases: nemáticos, esmécticos y colestéricos. La fase **nemática** exhibe orden en la orientación de sus moléculas y al mismo tiempo desorden en la posición

de sus centros de masa [3]. Las moléculas pueden moverse lateralmente, girar alrededor del eje común o deslizarse paralelamente a él, esto se presenta gráficamente a continuación:

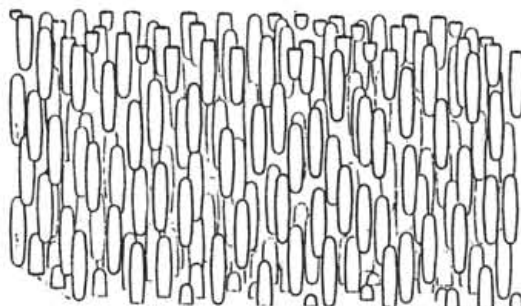


Figura. 1.8. Representación de la fase nemática

Se podría comparar este arreglo molecular con el de los cerillos dentro de una caja: aunque pueden moverse, la presencia de los demás impone restricciones a estos movimientos y tiende a mantenerlos paralelos entre sí. De este modo, respecto a la posición de sus centros de masa, un nemático se comporta como un líquido ordinario y sus moléculas se mueven caóticamente. En cambio difiere totalmente de un líquido ordinario en que sus moléculas se orientan y al moverse mantienen sus ejes paralelos a una dirección común.

En contraste con los nemáticos, que son la fase más desordenada de los cristales líquidos, los **esméticos** constituyen la fase más ordenada [3]. Tienden a organizarse en capas planas paralelas entre sí, como las hojas de un libro pero con sus ejes moleculares perpendiculares a estos planos y paralelos entre sí. Éste es, por ejemplo, el arreglo de las moléculas en las capas superficiales de una pompa de jabón y es el que le proporciona la cohesión necesaria para formarse. De hecho, esmético se deriva del vocablo griego que designa una sustancia de propiedades similares al jabón. Como en los nemáticos, las moléculas de esmético también pueden girar alrededor de la dirección de orientación común pero no pueden hacerlo fuera de la capa en que se encuentran. En cada plano las moléculas pueden acomodarse en filas con diferentes grados de orden de posición de sus centros de masa.

Cabe mencionar que dos subclases comunes de ordenamiento esmético son la fase esmética A, en la cual el director es paralelo a la capa

normal, y la fase esméctica C, en la cual el director y la capa normal forman un ángulo. Por lo tanto la fase esméctica C está formada de capas de moléculas inclinadas.

En el arreglo más desordenado de esta fase los centros de masa moleculares se mueven caóticamente en cada plano, de modo que en este caso el esméctico es nemático por planos, como se muestra en la figura siguiente²:

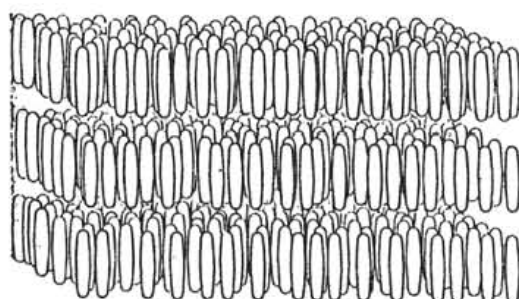


Figura.1.9. Representación de la fase esméctica.

La tercera fase de cristales líquidos posee una estructura molecular característica de muchos compuestos que contienen colesterol y por esta razón se le llama **colestérica** [3]. Como en los esmécticos, las moléculas de colestérico también pueden acomodarse en capas superpuestas, pero con una diferencia crucial: los ejes moleculares se orientan en una dirección paralela al plano mismo de las capas. Más aún, esta dirección cambia ligeramente de capa a capa debido a la peculiar estructura molecular de los colestéricos, y en consecuencia el eje de orientación, al pasar de un plano a otro, describe una trayectoria en forma de hélice, como se indica en la siguiente figura [3]:

² Debe enfatizarse, sin embargo, que en cualquier caso el esméctico es siempre fluido y las diferentes capas se deslizan, en mayor o menor grado, unas sobre otras.

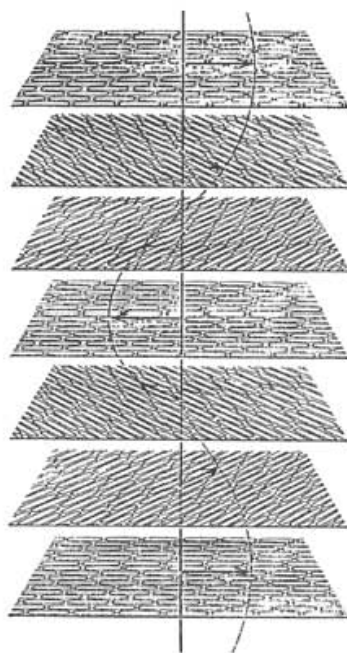


Figura.1.10. Representación de la fase colestérica

1.4. ESTRUCTURA QUÍMICA DE LOS CRISTALES LÍQUIDOS

Las moléculas que forman las fases de los cristales líquidos pueden presentar diferentes formas como ya dijimos, las más comunes son: de bastón o varilla (rod-like), y de disco (disc-like), la primera es la que ha encontrado mayor importancia tecnológica. Sin embargo, de forma general la estructura química básica y más común de una molécula de cristal líquido se representa de la siguiente manera:

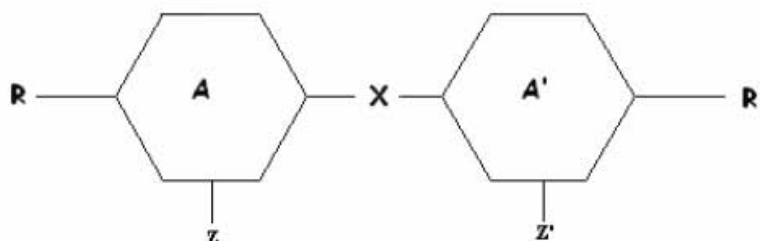


Figura.1.11. Estructura química de una molécula de cristal líquido.

Donde R y R' son grupos terminales, X es un grupo de enlace entre dos o más sistemas de anillos (A, A') y Z, Z' son sustituyentes laterales. Cada componente tiene un efecto significativo en las propiedades del

cristal líquido. Ejemplos de los grupos laterales y de los sustituyentes terminales son los grupos alquilo (C_nH_{2n+1}) y "alcoxi" ($C_nH_{2n+1}O$). Los enlaces "X" son enlaces simples o grupos semejantes al "estireno" ($-CH=CH-$), tolueno ($-C\equiv C-$), "azobenceno" ($-N=N-$) entre otros [5]. Dentro de los sistemas de anillos están principalmente los anillos aromáticos y ciclohexanos saturados (ofenil, bifenil y terfenil) e insaturados en distintas combinaciones.

Los grupos terminales (R y R'), extienden el eje longitudinal molecular, lo anterior provoca que el cristal líquido aumente su estabilidad térmica, es decir, estos grupos son los responsables de la alteración en la transición de temperaturas en un cristal líquido ya que mientras más alargada sea la molécula el efecto de la temperatura sobre ella es menor.

En la mayoría de los casos cualquier sustituyente lateral (Z y Z') ensancha la molécula, reduciendo así las atracciones laterales y disminuyendo la estabilidad de las fases nemáticas y esmécticas, aunque las fases inclinadas no son afectadas severamente. El tamaño, polaridad, posición y naturaleza de las cadenas laterales, son factores que juegan un papel muy importante en las propiedades de un cristal líquido [4].

El principal objetivo de los grupos de enlace (X) entre los sistemas de anillos, es alargar o acortar la molécula del cristal líquido influyendo de esta forma en la polarización y rigidez del mismo [5].

Los sistemas de anillos (A, A') juegan un papel primordial en la estructura química básica de un cristal líquido, ya que son los que influyen en sus propiedades más importantes, como lo son: el valor de la anisotropía dieléctrica, estabilidad química, birrefringencia, temperatura de transición, valor de las constantes elásticas y viscosidad del cristal. Generalmente dentro de la estructura molecular de un cristal líquido A y A', suelen ser anillos aromáticos (bencenos), sin embargo, también pueden ser sistemas alicíclicos, por ejemplo ciclohexil, o sistemas heterocíclicos (estructuras similares al benceno pero con anillos de grupo "piridina" o "pirimidina" [5]).

Las propiedades físicas y ópticas de los cristales líquidos dependen de las propiedades que gobiernan los grupos que los componen y de la forma en como se sintetizan químicamente éstos [4]. La forma de las moléculas de los cristales líquidos es larga y anisotrópica, por tanto muy compleja, así que es prácticamente absurdo tratar todas las posibles variaciones de su arquitectura y, 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 o de disco.

Las estructuras y el orden molecular de los cristales líquidos puede ser alterada 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 [7].

1.5. CONSTANTES FÍSICAS DEL 5CB

Este trabajo de tesis se refiere al estudio del cristal líquido nemático 4'-n-pentil-4-cianobifenil (5CB), las razones por las cuales elegimos este cristal líquido son: su bajo costo, su fase nemática se encuentra a la temperatura ambiente lo cual facilita su estudio. Otra razón es que sus moléculas se caracterizan por tener una forma elipsoidal y ser fácilmente polarizables en la dirección del eje mayor, además las moléculas nemáticas que poseen esta geometría son las que tienen mayor importancia tecnológica.

En la figura 1.12 podemos observar la estructura química de las moléculas del cristal líquido nemático 4'-n-pentil-4-cianobifenil (5CB), el cual fue sintetizado en 1969, siendo el primer miembro óptica y químicamente estable de los cianobifenilos, una de las familias de cristales líquidos que tienen mayores aplicaciones prácticas. Las moléculas del 5CB tienen un tamaño aproximado de 2 nm por 0.5 nm [8].

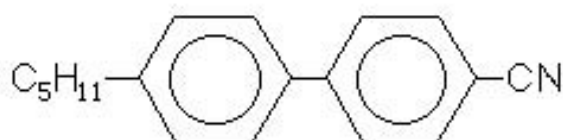


Figura. 1. 12 Estructura química del cristal líquido 4'-n-pentil-4-cianobifenil (5CB).

Por lo anterior en los temas posteriores en donde estemos hablando de los fenómenos que se presentan en los cristales líquidos, nos estaremos refiriendo a la fase nemática del 5CB. En la tabla 1.1 [8] presentamos algunas constantes físicas del 5CB a 25 °C, las cuales serán de gran utilidad en los cálculos numéricos.

CONSTANTE	5CB
Densidad (g cm^{-3})	1.0065
Punto de fusión ($^{\circ}\text{C}$)	24
Punto de aclaramiento ($^{\circ}\text{C}$)	35.3
Parámetro de orden (a 25°C)	0.65
(en el punto de aclaramiento)	0.49
Anisotropía diamagnética ($\text{CGS} \times 10^{-7}$)	1.7
Permitividades dieléctricas	
ϵ_{\parallel}	19.7
ϵ_{\perp}	6.7
Constantes elásticas ($\text{dyn} \times 10^{-7}$)	
K_1	6.4
K_2	3
K_3	8.42
Coeficientes de Leslie ($\text{Pa}\cdot\text{s}$)	
α_1	-0.0060
α_2	-0.0812
α_3	-0.0036
α_4	0.0652
α_5	0.0640
α_6	-0.0208

Tabla 1.1. Constantes físicas de 4'-n-pentil-4 - cianobifenil (5CB, 25°C).

1.6. INTERACCIÓN DE LOS CRISTALES LÍQUIDOS CON SUPERFICIES

Para el estudio de los cristales líquidos nemáticos se acostumbra confinarlos entre dos placas de vidrio³ con una separación que varía de entre 10 y 100 micras, donde se pueden controlar sus propiedades físicas, en estas condiciones las interacciones moleculares no son capaces de imponer una orientación dada al director, así que cada molécula se posiciona aleatoriamente. Aunque este procedimiento tiene algunas ventajas, también causa que el cristal líquido se comporte de

³ Cabe mencionar que el confinamiento no es siempre entre placas puede hacerse entre cilindros o cualquier otra geometría.

una manera compleja, debido a la competencia entre muchos efectos externos.

Debido a su naturaleza, los cristales líquidos son muy delicados y responden a casi cualquier factor externo, tanto que basta con que interactúen con una superficie para que el director tome una orientación en una dirección específica cerca de la superficie [7]. Por ejemplo una superficie de vidrio necesita solo ser frotada con un pedazo de tela antes de colocar el cristal líquido, esto forzará al director a permanecer a lo largo de la dirección del frotamiento. Otro tratamiento efectivo incluye la aplicación de un químico en el vidrio antes de adherir el cristal líquido, el químico (conocido como surfactante) se adhiere al vidrio provocando la alineación del director. En breve, la preparación de la superficie de vidrio puede producir un alineamiento del director en casi cualquier dirección. Entre las alineaciones más utilizadas tenemos las siguientes:

1. **Homeotrópico.** Alineamiento perpendicular a la superficie de vidrio. Esto puede lograrse inyectando un número pequeño de moléculas largas especiales, cuya forma es parecida a la de los renacuajos, es decir, tienen una cabeza grande con dipolo eléctrico constante y una cola larga que se parece a las moléculas del nemático [9]. Lo anterior provoca que la superficie del vidrio atraiga fuertemente a los dipolos, sobre todo si sobre ella se hallan cargas eléctricas o gotas de agua pequeñas (esto se debe a que las moléculas de agua poseen dipolos constantes). Así pues las cabezas bipolares de las moléculas que se inyectaron se pegan al vidrio, sus colas quedan perpendiculares a la placa y obligan a las moléculas cercanas a adoptar una posición perpendicular a la superficie de vidrio [7].

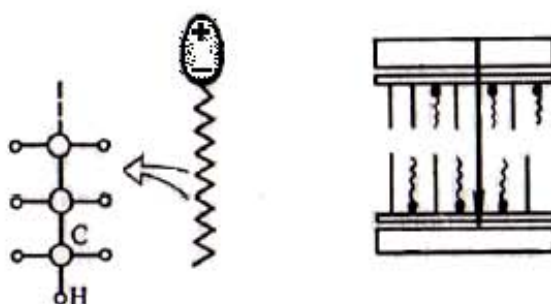


Figura. 1.13. Las moléculas de los surfactantes hacen que el nemático se oriente verticalmente a la placa.

2. **Homogéneo.** Alineamiento paralelo a la superficie de vidrio. Este es el caso más usual. Se ha encontrado que la mejor forma de orientar las moléculas nemáticas de manera paralela a la superficie de vidrio consiste en pulir en una sola dirección la superficie, provocando con esto surcos de entre 10 y 100 nanómetros de profundidad donde las moléculas se depositan y se adhieren a las paredes por las fuerzas de atracción [7]. Es así como un gran número de moléculas quedan adheridas a la superficie con una orientación determinada (paralela a la superficie) y ningún efecto térmico las puede mover de esta posición. Las capas del nemático sucesivas se orientan de la misma forma que las anteriores, pero este efecto se pierde conforme las moléculas se alejan de la superficie de vidrio [10].

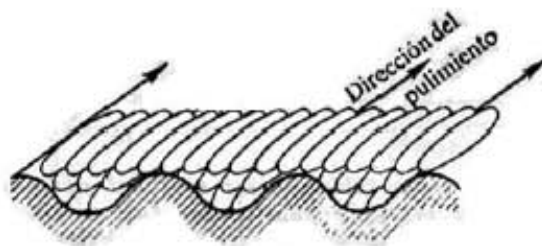


Figura. 1.14. Disposición de las moléculas en una superficie pulida.

El punto general importante que hay que recordar acerca de estos efectos es que la sensibilidad al alineamiento en la frontera es una consecuencia de la simetría rota de la fase nemática [7]. En la mayor parte, la energía de un dominio nemático es independiente de la orientación del director. Por lo tanto la más pequeña perturbación que puede cambiar la energía relativa de las diferentes orientaciones, será suficiente para imponer un arreglo en el material [9]. Cabe mencionar que las propiedades del cristal líquido nemático no se modifican con la aplicación de cualquiera de los procedimientos previamente descritos.

Al aplicar el procedimiento antes descrito para lograr un alineamiento homogéneo en las dos placas de vidrio en las cuales se encuentra confinado el cristal líquido nemático para su estudio, obtenemos lo que se conoce como celda nemática con configuración planar – planar, que es la que será utilizada para la realización de este trabajo de tesis.

1.7. CONSTANTES ELÁSTICAS DE UN CRISTAL LÍQUIDO NEMÁTICO

Nosotros tenemos la idea de que los sólidos son rígidos, eso nos hace olvidar que la propiedad de la rigidez es a veces compleja. Después de todo, sabemos que los cuerpos [sólidos](#) están formados por átomos densamente empaquetados con intensas fuerzas de interacción entre ellos. Los efectos de interacción son responsables de las propiedades mecánicas, térmicas, eléctricas, magnéticas y ópticas de éstos. No es sólo la fuerza de las interacciones moleculares la que permite que las fuerzas macroscópicas sean transmitidas sobre distancias macroscópicas. A final de cuentas, la densidad de un sólido es usualmente muy similar a la densidad de su fundido y la energía total de interacción en las dos situaciones es muy parecida. Aun así, la diferencia en el comportamiento es cualitativa: los sólidos son rígidos y los líquidos no. La diferencia está en el gran orden estructural de los sólidos, es decir, una característica importante de la mayoría de los sólidos es su [estructura cristalina](#), los átomos están distribuidos en posiciones definidas que se repiten regularmente de manera geométrica. La distribución específica de los átomos se debe a una variada gama de fuerzas, las cuales actúan para mantener la precisión absoluta del orden cristalino [9]. Por lo tanto siempre que algo tenga algún tipo de orden estructural, tiene algún tipo de rigidez la cual garantiza que el sistema actúe lo mejor posible para mantener su orden estructural cuando una parte de él es perturbada.

En un sólido, esta rigidez es descrita por la teoría de la elasticidad. Si se aplica una tensión a un cristal en respuesta éste se deformará, pero esta deformación conduce a una perturbación en su orden estructural. Por lo tanto, esta deformación conduce a un incremento en la energía del sólido proporcional al cuadrado de la medida de la deformación, si la deformación es relativamente pequeña (Ley de Hooke) y si se deja de aplicar la tensión el cristal regresará a su forma original [9]. Este comportamiento elástico está en contraste con el comportamiento de un líquido, el cual no muestra rigidez, si se aplica una tensión el líquido fluye.

Si se aplica una tensión en un cristal líquido, y ésta provoca una deformación que perturba cualquier orden estructural que el sistema posea, entonces la deformación será opuesta por un incremento en la energía elástica. Por otro lado, si se aplica una tensión que nos diera como resultado una deformación que no perturba el orden estructural,

entonces no habría un incremento en la energía elástica y el material respondería fluyendo. Por lo tanto la esencia de la respuesta mecánica de un cristal líquido es que tiene una respuesta elástica para algunos tipos de deformación, y responde a otras como un líquido. Un cristal líquido nemático fluiría como un líquido en respuesta a un simple esfuerzo de corte, porque la deformación resultante deja sin alterar el orden orientacional estructural. Por otro lado, hay tipos de deformación más complicados, que nos dan como resultado un incremento en la energía elástica. Se pueden definir constantes para estos tipos de deformación. Con respecto a esto último se han encontrado tres deformaciones básicas posibles en un cristal líquido nemático, éstas son: **“splay”** (apertura), **“twist”** (torsión) y **“bend”** (pandeamiento).

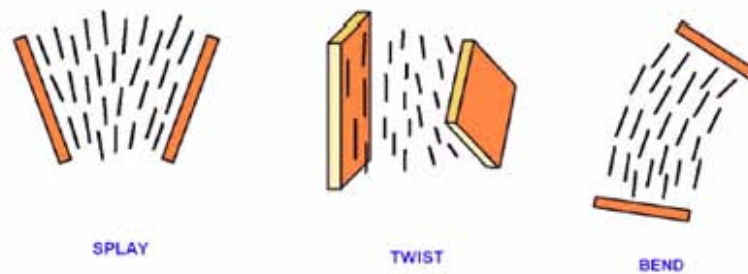


Figura. 1. 15. Tipos básicos de deformación en cristales líquidos nemáticos.

En el límite continuo, un cristal líquido nemático se puede caracterizar en un estado de deformación por el campo vectorial $\mathbf{n}(\mathbf{r})$, dando el director en cada punto \mathbf{r} . En analogía con un cambio en la longitud de un resorte (ley de Hooke), se puede expresar la energía elástica que surge al deformar un cristal líquido en términos de constantes elásticas, pero esta situación (en un cristal líquido) 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. Formalmente, se pueden enumerar las derivadas espaciales de $\mathbf{n}(\mathbf{r})$, el cual forma un tensor de segundo orden; donde se puede simplificar el número de términos explotando las propiedades de simetría del sistema. De esta forma es posible obtener al final solamente tres constantes elásticas independientes logrando con ello obtener la expresión de la energía elástica de distorsión por unidad de volumen de un cristal líquido nemático, que se escribe como [9]:

$$F_d = \frac{1}{2}K_1(\nabla \cdot \mathbf{n})^2 + \frac{1}{2}K_2(\mathbf{n} \cdot \nabla \times \mathbf{n})^2 + \frac{1}{2}K_3(\mathbf{n} \times \nabla \times \mathbf{n})^2 \quad (1.1)$$

ésta es la energía libre de Frank – Oseen en donde K_1 , K_2 , K_3 son las tres constantes elásticas. Esas tres constantes corresponden a los tres tipos de deformación en cristales líquidos nemáticos: apertura (splay), torsión (twist), y pandeamiento (bend) respectivamente. En la práctica, se encuentra que los valores para las constantes elásticas en moléculas pequeñas típicas son del orden 10^{-12} N [1]. Las tres constantes están en el mismo orden de magnitud, aunque K_3 es generalmente más grande que las otras dos, además su valor decrece conforme aumenta la temperatura.

1.8. RESPUESTA DE UN CRISTAL LÍQUIDO NEMÁTICO A UN CAMPO ELÉCTRICO

La respuesta de los cristales líquidos a campos eléctricos es quizás la mejor muestra de la delicadeza natural de esta fase de la materia. Los sólidos, líquidos y gases responden a campos eléctricos, pero la respuesta es mínima aún cuando los campos aplicados son fuertes, por el contrario los cristales líquidos, responden aun cuando los campos eléctricos son débiles con cambios estructurales significativos [7].

La mayoría de las moléculas de cristales líquidos están compuestas de átomos neutros y por lo tanto no son cargadas. Sin embargo, algunas veces la vinculación entre los átomos de la molécula causa que una parte de la molécula sea ligeramente positiva y otra parte sea ligeramente negativa, esta separación de cargas positivas y negativas es llamada *dipolo eléctrico permanente*. Si el campo eléctrico no está presente, los dipolos eléctricos permanentes sobre las moléculas de cristal líquido no son alineados, aun si el orden orientacional esta presente. Esto es cierto para moléculas con una ligera separación de carga a lo largo de ellas, porque una molécula puede tender a orientarse por el director así como también su terminación cargada positivamente o la cargada negativamente apuntar en la misma dirección [10]. En ausencia de un campo eléctrico, existen igual número de moléculas con partes cargadas positivamente y negativamente apuntando a cualquier dirección. De la misma forma un dipolo eléctrico permanente que atraviesa la molécula tiene la misma probabilidad a orientarse en cualquier dirección perpendicular al director.

Pero esta situación es muy diferente si un campo eléctrico es aplicado. Como se muestra en la figura 1.16 las partes cargadas de la molécula experimentan fuerzas opuestas. Las dos fuerzas sobre la molécula no le causan movimiento en ninguna dirección, sino que provocan que la molécula gire hasta que las partes positivas y negativas se alinean con el campo eléctrico. Notemos que esto tiende a causar que las moléculas se orienten paralela o perpendicularmente al campo eléctrico, dependiendo de cómo ocurra la separación de las cargas en la molécula. Conforme la magnitud del campo eléctrico se incrementa, las fuerzas también se incrementan tendiendo a orientar la molécula hacia una cierta dirección [10].

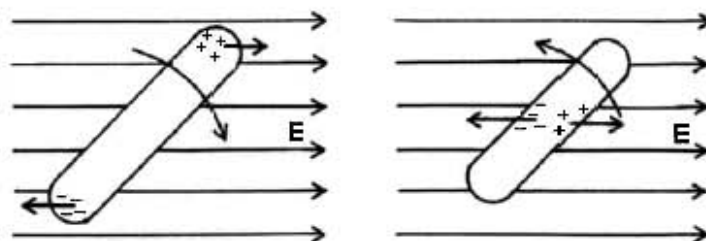


Figura. 1.16. Orientación de un dipolo eléctrico, debido a un campo eléctrico.

En muchas moléculas de cristales líquidos, la vinculación entre los átomos no produce ninguna separación de carga, esas moléculas responden a campos eléctricos de diferente manera, puesto que el campo eléctrico produce fuerzas sobre todas las cargas atómicas (positivas en el núcleo y negativas los electrones), es posible para el campo eléctrico desplazar las cargas positivas ligeramente en una dirección y las cargas negativas en otra. Esto produce un dipolo eléctrico, pero éste está presente sólo cuando se aplica un campo eléctrico. Estos dipolos son llamados *dipolos eléctricos inducidos* y usualmente son mucho más débiles que los dipolos eléctricos permanentes. De cualquier manera, un dipolo eléctrico inducido experimenta las mismas fuerzas que un dipolo permanente en la presencia de un campo eléctrico, por lo tanto tiende a orientarse con las partes positivas y negativas de la molécula a lo largo del campo.

Sabiendo como responden las moléculas a campos eléctricos, no es difícil entender como se comportan los cristales líquidos. Si la molécula tiende a orientar su eje longitudinal a lo largo del campo eléctrico,

entonces el campo eléctrico causa que las moléculas del cristal líquido tiendan a permanecer paralelas a él. El orden orientacional no es más grande que en la ausencia de un campo eléctrico, la diferencia es que el campo eléctrico provoca que el director del cristal líquido se oriente paralelo a él. Si la molécula tiende a orientarse perpendicularmente al campo eléctrico, entonces la presencia de éste causa que el director permanece perpendicular a él, la magnitud del campo necesario para orientar el director del cristal líquido es relativamente baja por lo cual el director es libre de orientarse en cualquier dirección [7].

Considerando un conjunto de moléculas de cristal líquido en forma de "varillas", cada una con su terminación superior cargada positivamente y su terminación inferior cargada negativamente, analizando esto en conjunto, tenemos una parte superior con las cargas positivas y en los fondos las cargas negativas, es decir, tenemos un dipolo eléctrico grande. Debido a que la fuerza del dipolo eléctrico depende del tamaño de la muestra de cristal líquido, usualmente se acostumbra referirse al dipolo eléctrico por unidad de volumen, de esta manera se pierde la independencia con el tamaño de la muestra. El dipolo eléctrico por unidad de volumen es llamado *polarización eléctrica*. Cuando la fase nemática es puesta en un campo eléctrico \mathbf{E} , éste induce una polarización \mathbf{P} la cual está dada, en un sistema isotrópico, por [9]:

$$\mathbf{P} = (\epsilon - 1) \epsilon_0 \mathbf{E} \quad (1.2)$$

donde ϵ es la constante dieléctrica y ϵ_0 es la permitividad dieléctrica en el vacío. En un cristal líquido nemático, el grado para el cual el material puede ser polarizado depende de si el campo es aplicado paralela o perpendicularmente al director.

En la figura 1.17 se puede observar la respuesta al aplicar un campo en un cristal líquido nemático en el cual las moléculas tienen un dipolo paralelo a sus ejes longitudinales. Mucho más polarización puede ser inducida cuando el campo aplicado es en la misma dirección que el director. La consecuencia es que el coeficiente dieléctrico paralelo al director $\epsilon_{||}$ es más grande que el coeficiente dieléctrico perpendicular al director ϵ_{\perp} . La situación es al revés si el momento bipolar es perpendicular al eje longitudinal de la molécula; entonces tenemos que $\epsilon_{||} < \epsilon_{\perp}$ [9].

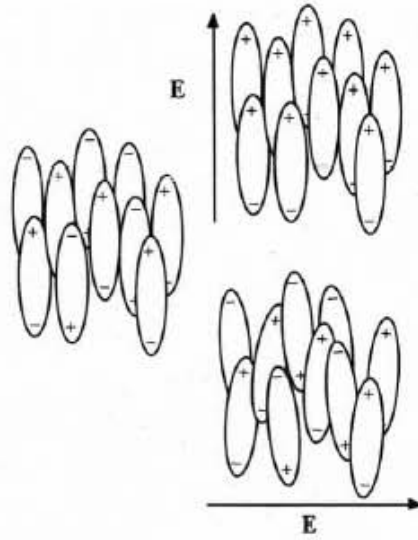


Figura 1.17. Anisotropía dieléctrica en un cristal líquido nemático, en el cual existe un dipolo permanente paralelo al eje longitudinal de la molécula. En ausencia de campo eléctrico (izquierda), no hay un momento bipolar neto. Si el campo es aplicado paralelamente al director (dibujo superior derecho), es relativamente fácil obtener un dipolo grande inducido, mientras que si el campo es perpendicular al director (dibujo inferior derecho) el grado de polarización es mas pequeño.

La consecuencia de esto es que los campos eléctricos son capaces de alinear los cristales líquidos nemáticos eficientemente. En el caso de un dipolo paralelo, si el director se ajusta para estar paralelo al campo aplicado, el campo eléctrico dentro del material es reducido por el efecto de polarización y como resultado la energía total del sistema es reducida. Para la aplicación de un campo en una dirección general, se puede escribir la energía en términos del desplazamiento \mathbf{D} . Esto está dado por [9]:

$$\mathbf{D} = \varepsilon_{\perp} \mathbf{E} + (\varepsilon_{\parallel} - \varepsilon_{\perp})(\varepsilon_{\parallel} - \varepsilon_{\perp})(\mathbf{n} \cdot \mathbf{E}) \mathbf{n} \quad (1.3)$$

Así que se puede escribir la energía por unidad de volumen asociada con el campo eléctrico, F_{el} , como [2]:

$$F_{el} = -\frac{1}{4\pi} \int \mathbf{D} \cdot d\mathbf{E} = -\frac{\varepsilon_{\perp}}{8\pi} \mathbf{E}^2 - \frac{\varepsilon_a}{8\pi} (\mathbf{n} \cdot \mathbf{E})^2 \quad (1.4)$$

Donde $\varepsilon_a = \varepsilon_{\parallel} - \varepsilon_{\perp}$ y el director está a lo largo del vector unitario \mathbf{n} . Por lo tanto para dipolos paralelos al eje longitudinal ε_a es positivo y la energía es reducida cuando el cristal líquido nemático se alinea a lo largo del campo. Los valores típicos de ε_{\parallel} y ε_{\perp} (constantes dieléctricas paralela y perpendicular al vector director \mathbf{n}) son del orden de $5\varepsilon_0$ [4].

1.9. LA TRANSICIÓN DE FREEDERICKSZ

La alineación de las moléculas de cristal líquido es altamente sensitiva a campos externos; estos incluyen los campos eléctricos, magnéticos, y a los efectos de las superficies en la imposición del alineamiento. Existe una clase interesante de efectos de transición que ocurre cuando compiten dos alineamientos antagónicos [1].

Quizás la más simple de estas transiciones ocurre cuando se tiene una película delgada de un cristal líquido nemático encerrada entre 2 placas. Si esas placas han sido tratadas para provocar una alineación del director paralelo en ambas superficies, el director está restringido a apuntar en una cierta dirección (paralelo a la superficie), es decir, posee un alineamiento homogéneo. Si un campo eléctrico se aplicara perpendicularmente a las superficies de vidrio, provocaría que la orientación del director fuera paralela al campo, las moléculas cercanas a las superficies no están muy libres para orientarse con el campo, pero las moléculas que se encuentran en el centro de las dos placas se encuentran lo suficientemente libres para alinearse con el campo. El campo eléctrico, por lo tanto, causa el cambio en la orientación del director en el centro de la celda, y un cambio imperceptible cerca de las superficies.

El aspecto más interesante de esta deformación es que no ocurre conforme incrementamos la fuerza del campo eléctrico, para campos con fuerza debajo de un cierto valor, en este caso el cristal líquido permanece con su alineación homogénea sin alterarla. Después para algún valor del campo, la deformación empieza y se hace más grande conforme se incrementa la fuerza del campo. Esta transición de una configuración sin deformar a otra deformada para un cierto valor del campo eléctrico es llamada *Transición de Freedericksz*, ya que este

científico ruso estudio dicho fenómeno en 1930. Lo anteriormente expuesto lo podemos observar en la siguiente figura [10]:



Figura. 1. 18. Transición de Fredericksz, para un alineamiento molecular homogéneo.

CAPITULO 2. HIDRODINÁMICA DE CRISTALES LÍQUIDOS

Para analizar las propiedades físicas de las moléculas de cristales líquidos, se suelen confinar en un volumen de control (en una celda), y estudiarlo como si se tratara de un sólido. A este proceso se le conoce como "Teoría Elástica o Continua" [4], muchos de los fenómenos físicos más importantes que exhibe la fase nemática de un cristal líquido, tales como sus inusuales propiedades de flujo o su respuesta a campos eléctricos y magnéticos, se pueden estudiar considerando al cristal líquido como un medio continuo, esto lo podemos hacer en nuestro sistema de estudio gracias a la diferencia de escalas que existe entre las moléculas y el espesor de la celda, es decir expresando esto con números tenemos que si el espesor de nuestra celda es de 100 micras y sabiendo que el tamaño de las moléculas es de 2 nm, cabrían 200000 moléculas a lo largo de la celda, esto nos permite considerar al nemático como un medio continuo (hipótesis del continuo). Por lo anterior en este segundo capítulo trataremos la hidrodinámica de los cristales líquidos, auxiliándonos del enfoque de Ericksen – Leslie – Parodi (nematodinámica) que es el más empleado en la discusión del estado nemático. Además hablaremos del papel que juegan los coeficientes de Miesowicz en los cristales líquidos. Este capítulo nos proporcionara algunas definiciones y conceptos básicos necesarios para entender el análisis posterior (capítulo 3) de la física del cristal líquido nemático (5CB) confinado dentro de una celda planar- planar.

2.1. VISCOSIDAD ABSOLUTA

Consideremos un fluido contenido entre dos placas planas y paralelas, de área "A", separadas entre sí por una distancia muy pequeña "Y" (ver figura. 2.1). Supongamos que el sistema está inicialmente en reposo, pero que al cabo del tiempo t , la placa inferior se pone en movimiento en la dirección del eje "X", con una velocidad constante "V". A medida que transcurre el tiempo el fluido gana cantidad de movimiento y finalmente se establece el perfil de velocidad en régimen estacionario¹, que se indica en la figura. 2.1. Una vez alcanzado dicho estado estacionario de movimiento, es preciso aplicar una fuerza constante "F"

¹ Es importante mencionar que el orden de magnitud para alcanzar este régimen estacionario es de microsegundos.

para conservar el movimiento de la lámina inferior. Esta fuerza viene dada por la siguiente expresión [11]:

$$\frac{F}{A} = \eta \frac{V}{Y} \quad (2.1)$$

es decir, que la fuerza por unidad de área es proporcional a la disminución de la velocidad con la distancia "Y". La constante de proporcionalidad η se denomina coeficiente de *viscosidad* del fluido, también es conocido como viscosidad absoluta o dinámica. En general, la viscosidad aumenta muy débilmente con la presión, pero es afectada fuertemente por la variación de la temperatura [12]. Al cociente de la viscosidad dinámica y la densidad de un líquido se conoce como viscosidad cinemática [11].

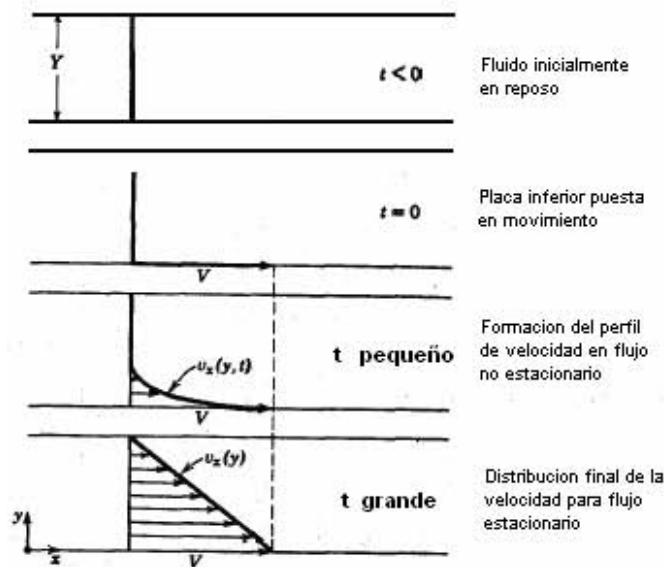


Figura 2.1. Formación del perfil de velocidad en estado estacionario para un fluido contenido entre dos placas.

Es conveniente expresar la ecuación 2.1 en una forma más explícita. El esfuerzo cortante que se ejerce en la dirección "x" sobre la superficie de un fluido, situada a una distancia constante "y", por el fluido existente en la región donde "y" es menor, se designa por τ_{yx} , y el componente

“x” del vector de velocidad del fluido, por v_x . De acuerdo con estos símbolos, la ecuación 2.1 queda de la siguiente forma [11]:

$$\tau_{yx} = -\eta \frac{dv_x}{dy} \quad (2.2)$$

Es decir, que la fuerza de corte por unidad de área (esfuerzo de corte) es proporcional al gradiente negativo de la velocidad local.

2.2. FLUIDOS NEWTONIANOS Y FLUIDOS NO – NEWTONIANOS

La ecuación 2.2 es la ley de Newton de la viscosidad, y los fluidos que la cumplen se denominan **fluidos newtonianos**. Todos los gases y la mayor parte de los líquidos, se comportan de acuerdo a esta ecuación.

De acuerdo con la ley de la viscosidad de Newton (ecuación 2.2), al representar gráficamente τ_{yx} frente a $-(dv_x/dy)$ para un fluido determinado, debe de obtenerse una línea recta que pasa por el origen de coordenadas, y cuya pendiente es la viscosidad del fluido a una cierta temperatura y presión (ver figura 2.2). En efecto, la experiencia demuestra que para todos los gases y los líquidos homogéneos no polimerizados τ_{yx} es directamente proporcional a $-(dv_x/dy)$. Sin embargo, existen algunos materiales industrialmente importantes que no se comportan de acuerdo con la ecuación 2.2. Se conoce a estas sustancias con el nombre de fluidos **no-newtonianos**.

El tema del flujo no-newtoniano constituye actualmente una parte de otra ciencia más amplia que es la **reología**, es decir, “la ciencia del flujo y la deformación”, que estudia las propiedades mecánicas de los gases, líquidos, plásticos, sustancias asfálticas y materiales cristalinos [11].

En los fluidos no newtonianos la viscosidad depende del valor del esfuerzo aplicado. Para estos fluidos, a la pendiente del esfuerzo cortante vs la variación de la deformación se le denomina viscosidad aparente η_{ap} . En fluidos newtonianos, la viscosidad aparente es igual que la viscosidad dinámica ya que esta es independiente de la variación del esfuerzo aplicado [13].

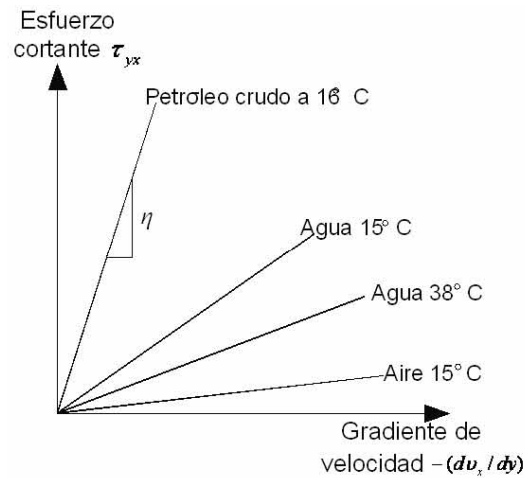


Figura 2.2 Variación lineal del esfuerzo cortante vs el gradiente de velocidad.

2.3. FLUIDOS PSEUDOPLASTICOS Y FLUIDOS DILATANTES

En un fluido “pseudoplástico”, la resistencia a la deformación disminuye si el esfuerzo cortante aumenta, efecto conocido como “**shear thinning**” (la viscosidad disminuye conforme se incrementa el esfuerzo cortante aplicado). La gelatina, la sangre y el cemento líquido son ejemplos de ésta categoría. Si el efecto es muy importante como en el caso marcado de la figura 2.3 (a), el fluido se denomina “plástico”. El caso límite de las sustancias plásticas es el plástico ideal o plástico de Bingham en el cual se requiere un esfuerzo mínimo (límite de fluencia) antes de que fluya. Un ejemplo de fluido plástico es la pasta de dientes, que no fluye al exterior hasta que por apretar el tubo se vence un cierto esfuerzo [12].

En contraste, un fluido dilatante es aquel en que la viscosidad aumenta al aumentar el esfuerzo cortante, es decir, ocurre el efecto denominado “**shear thickening**” (la viscosidad se incrementa cuando aumenta el esfuerzo cortante aplicado). Son ejemplos de estas sustancias las soluciones concentradas de azúcar en agua.

Si la viscosidad aparente cambia en relación al tiempo durante el cual se aplican las fuerzas de corte pueden existir otras formas de comportamiento no-newtoniano. Por ejemplo, los fluidos que presentan

una disminución limitada de la viscosidad aparente con el tiempo, al aplicar repentinamente un esfuerzo cortante τ_{yx} se denominan "**tixotrópicos**" (ver figura 2.3 (b)), recibiendo el nombre de "**reopécticos**" los que dan lugar a un aumento de la viscosidad aparente con el tiempo en esas condiciones [7]. Los fluidos que recobran parcialmente la forma original al cesar el esfuerzo cortante se denominan **viscoelásticos** [11].

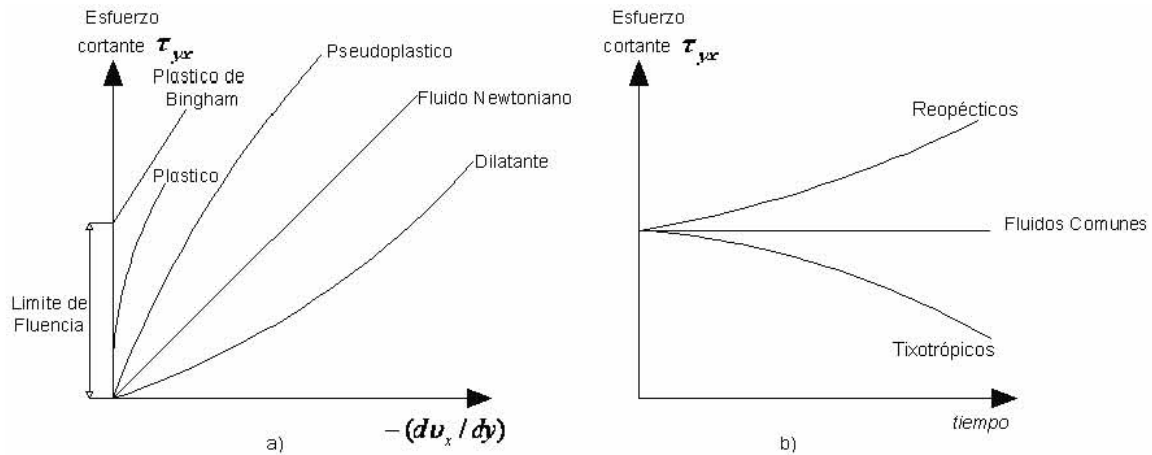


Figura 2.3. Viscosidad a) esfuerzo en función del gradiente de velocidad; b) efecto del tiempo sobre el esfuerzo de corte aplicado.

2.4. TENSOR DE ESFUERZOS

En el estudio del continuo se distinguen dos tipos de distribuciones de fuerza. Aquellas distribuciones de fuerza que actúan sobre la materia sin requerir un contacto directo se conocen como **distribuciones de fuerzas de cuerpo o de volumen**. La fuerza gravitacional sobre un cuerpo es la distribución de fuerza de cuerpo más común. La distribución de fuerza magnética sobre un material magnetizado en un campo magnético también es una distribución de fuerza de cuerpo; las fuerzas de cuerpo se expresarán como fuerza por unidad de masa del material sobre el cual actúan. La segunda clase de distribución de fuerzas ocurre cuando hay contacto directo entre un cuerpo y el medio que lo rodea; ésta se conoce como una **distribución superficial de fuerza** o una **distribución superficial de tracción** [14]. Las fuerzas superficiales se expresan como fuerza por unidad de área del material sobre el cual actúan. Las fuerzas de superficie existen sobre las fronteras físicas de un cuerpo u ocurren cuando se hace un "corte matemático" sobre el cuerpo para "exponer" una superficie [14].

El concepto de “esfuerzo”, se derivó del estudio de la resistencia y fallas de los sólidos. El campo de esfuerzos es la distribución de “tracciones” internas que balancean a un conjunto dado de tracciones externas y fuerzas de cuerpo. A través de un punto puede haber un infinito número de esfuerzos, es por ello que para representar geoméricamente dichos esfuerzos se requiere algo más que un vector. Es aquí donde surge el “**Tensor de Esfuerzos**”, con el cual con sólo conocer tres del infinito número de esfuerzos, es posible calcular todos los demás [15].

La tracción externa \mathbf{T} representa la fuerza por unidad de área que actúa en un determinado punto sobre la superficie de un cuerpo. La tracción \mathbf{T} es un **vector límite**, lo cual quiere decir que no puede deslizarse a lo largo de su línea de acción o trasladarse a otro punto y permanecer con el mismo significado. En otras palabras, un vector tracción no puede ser descrito completamente a menos que se especifique un punto de área Δs en el cual actúe una fuerza ΔF . Dando ΔF y Δs , la tracción puede definirse como el límite de la relación $(\Delta F/\Delta s)$ cuando Δs tiende a cero [16]:

$$T = \lim_{\Delta s \rightarrow 0} \frac{\Delta F}{\Delta s} = \frac{dF}{ds} \quad (2.3)$$

Por lo tanto “esfuerzo”, puede ser interpretado como tracciones internas que actúan en un punto interno “P” definido en un plano (ver figura 2.4). El esfuerzo no puede medirse sin primero especificar el punto en el plano.

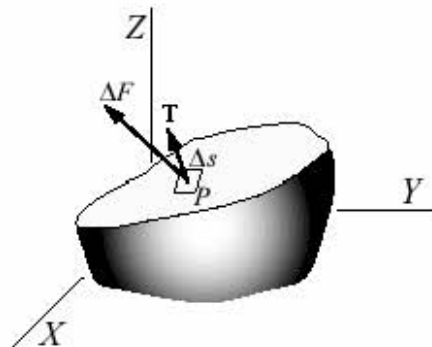


Figura 2.4. Definición de esfuerzo en un punto “P” de área Δs que transmite una fuerza ΔF .

Las tracciones de superficie o esfuerzos que actúan en un punto interno de un plano, son típicamente descompuestos en tres componentes ortogonales. Una componente es perpendicular a la superficie y

representa un esfuerzo normal. Los otros dos componentes son tangenciales a la superficie y representan esfuerzos de corte. Lo que diferencia a un esfuerzo normal de un esfuerzo de corte es que el primero de estos tiende a cambiar el volumen del material (por ejemplo la presión hidrostática), mientras que el segundo tiende a deformar el material sin cambiar su volumen.

Por ejemplo, si se trazaran seis planos alrededor de un punto "P" de manera que se defina un elemento infinitesimal de volumen "dv", con aristas "dx", "dy" y "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 aplicada (ver figura 2.5). El primer subíndice de cada componente de esfuerzo denota la cara en la que actúa dicho componente y el segundo indica la dirección en la que lo hace [12].

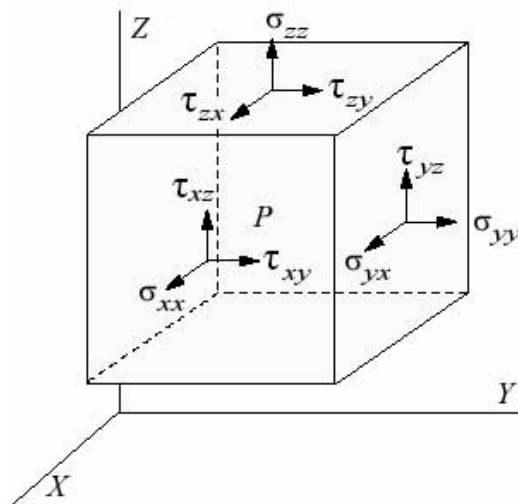


Figura 2.5. Cubo de material infinitesimal que muestra los nueve componentes del tensor esfuerzo.

Puesto que cada punto del cubo está bajo equilibrio estático (ninguna fuerza neta en la ausencia de cualquier fuerza de cuerpo), solo nueve componentes de esfuerzo de tres caras del cubo son necesarias para describir el estado de esfuerzo en el punto "P". Esos nueve componentes pueden organizarse dentro de una matriz [15]:

$$\sigma = \begin{bmatrix} \sigma_x & \tau_{xy} & \tau_{xz} \\ \tau_{yx} & \sigma_y & \tau_{yz} \\ \tau_{zx} & \tau_{zy} & \sigma_z \end{bmatrix} \quad (2.4)$$

donde los esfuerzos de corte al otro lado de la diagonal principal son idénticos (es decir, $\tau_{xy} = \tau_{yx}$, $\tau_{yz} = \tau_{zy}$, y $\tau_{zx} = \tau_{xz}$) como resultado del equilibrio estático (ningún momento neto). Este grupo de nueve componentes de esfuerzo es conocido como el “**Tensor de Esfuerzos**” (o matriz esfuerzo).

2.6. LA TEORÍA DEL CONTINUO PARA EL ESTADO NEMÁTICO (NEMATODINÁMICA)

Muchos de los fenómenos físicos más importantes que exhibe la fase nemática, tales como sus inusuales propiedades de flujo o su respuesta a campos eléctricos y magnéticos, se pueden estudiar considerando al cristal líquido como un medio continuo. Los cimientos del modelo continuo fueron colocados en los 1920’s por Oseen y Zöcher quienes desarrollaron una teoría estática la cual demostró ser muy exitosa. El tema permaneció aletargado por casi treinta años, hasta que Frank reexaminó el tratamiento de Oseen y lo presentó como una teoría de curvatura elástica. Posteriormente teorías dinámicas fueron desarrolladas por Anzelius y Oseen, pero la formulación de las leyes generales de conservación y las ecuaciones constitutivas que describen el comportamiento mecánico del estado nemático fueron obra de Ericksen y Leslie [17]. Algunas veces también se menciona a Parodi ya que realizó una simplificación adicional a las ecuaciones originales. Se han propuesto otras teorías del continuo, pero resulta que el enfoque de Ericksen – Leslie – Parodi (ELP) es el más empleado en la discusión del estado nemático.

La teoría hidrodinámica macroscópica ELP se basa en la mecánica clásica. La dinámica del director \mathbf{n} se deduce de la conservación del momento angular. Este enfoque ha servido como guía para muchos experimentos y es usado en la mayoría de los libros de texto. Sin embargo, no está claro como el modelo ELP puede transferirse a otros sistemas ordenados, por ejemplo la fase esméctica A, donde la variable de simetría-rota es el desplazamiento de las capas en lugar de la rotación del director.

La forma general de deducir las ecuaciones hidrodinámicas para cristales líquidos nemáticos (teoría ELP) consiste básicamente en definir

cinco cantidades de conservación (masa, energía y momentum en sus tres componentes), luego escribir sus cinco leyes de conservación por unidad de volumen. En este caso las perturbaciones termodinámicas del fluido se consideran despreciables debido a que se trata de un estado en equilibrio, 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. Después partiendo de las ecuaciones constitutivas se calcula la producción de entropía para un fluido isotrópico y con ella se deduce la forma del tensor de esfuerzos viscosos en los cristales líquidos nemáticos. La ecuación básica constitutiva de Leslie- Ericksen para el tensor esfuerzo viscoso, empleando la notación de sufijos con la convención de sumatoria de índices repetidos es (los términos serán discutidos mas adelante) [18]:

$$\sigma_{ij} = \alpha_1(n_k V_{kl} n_l) n_i n_j + \alpha_2 n_i N_j + \alpha_3 N_i n_j + \alpha_4 V_{ij} + \alpha_5 n_i n_k V_{kj} + \alpha_6 V_{ik} n_k n_j . \quad (2.8)$$

De la ecuación 2.8, es claro que $\boldsymbol{\sigma}$ y \mathbf{V} son tensores, ya que tienen dos subíndices, mientras \mathbf{n} (el director) y \mathbf{N} son vectores teniendo un único subíndice. Los seis coeficientes α_1 a α_6 (pudiendo ser positivos o negativos), son conocidos como los coeficientes de Leslie, y tienen las unidades de la viscosidad [$\text{kg m}^{-1}\text{s}^{-1}$] en SI y [Poise] en cgs. El tensor σ_{ij} representa el esfuerzo de corte viscoso en el fluido nemático. Como se muestra en la ecuaciones (2.8), es la suma de los seis términos que expresan los "torques" (momentos de torsión) desarrollados en el líquido anisotrópico, los cuales están asociados con el flujo rotacional y el no rotacional.

Si se aplica un campo externo, como lo puede ser un campo eléctrico "E" de baja frecuencia, se requiere una segunda ecuación:

$$E_i = (\alpha_3 - \alpha_2) N_i + (\alpha_3 - \alpha_2) V_{ik} n_k \quad (2.9)$$

Donde $\mathbf{n} \times \mathbf{E}$ es el torque por unidad de volumen causado por el campo externo (este torque aparece, porque el campo tendrá el efecto de orientar al director, independientemente del torque generado por el flujo).

Además, la teoría Ericksen – Leslie asume que el fluido es incompresible y que la magnitud del director es fija. También se puede mostrar que

sólo cinco de los seis coeficientes de Leslie son independientes, ya que [19]:

$$\alpha_3 - \alpha_2 = \alpha_6 - \alpha_5 \quad (2.10)$$

una relación que a menudo hace referencia al nombre de su descubridor, Parodi.

El significado de los símbolos en las ecuaciones anteriores se explicará enseguida:

σ : En la notación de sufijos se escribe como σ_{ij} . Representa el esfuerzo de corte asociado con la viscosidad del fluido. En el caso donde “ i ” y “ j ” son ortogonales, “ j ” representa la dirección de la fuerza cortante e “ i ” la dirección normal en la que los planos se cortan. Por lo tanto para esfuerzos de corte de un nemático entre dos placas, “ j ” será paralela a la dirección de corte, e “ i ” será normal a las placas.

n : es el vector unitario que representa al director del nemático.

V : este es un tensor de corte torcional, que describe solamente el cambio en la forma, asociada con el flujo y no con la rotación. Es un tensor simétrico el cual puede expresarse en términos de gradientes en el campo de velocidades [19]:

$$V_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial v_i}{\partial x_j} + \frac{\partial v_j}{\partial x_i} \right) , \quad (2.11)$$

donde v es una velocidad lineal con componentes v_i . Es interesante notar que para un líquido isotrópico, la ecuación (2.8), se reduce a [18]:

$$\sigma_{ij} = \alpha_4 V_{ij} \quad (2.12)$$

α_4 en este caso equivale a la viscosidad “ η ”, como comúnmente la usamos.

N: este es un vector que expresa el ritmo con el cual la orientación del director cambia con el tiempo respecto a la orientación original del fluido. Puede escribirse como [18]:

$$\mathbf{N} = \frac{d\mathbf{n}}{dt} - (\boldsymbol{\omega} \times \mathbf{n}) , \quad (2.13a)$$

con
$$\boldsymbol{\omega} = \frac{1}{2} \nabla \times \mathbf{v} . \quad (2.13b)$$

($\nabla \times \mathbf{v}$ es llamado la vorticidad del fluido). En forma de componentes este puede escribirse como:

$$\boldsymbol{\omega} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial v_y}{\partial z} - \frac{\partial v_z}{\partial y}, \frac{\partial v_z}{\partial x} - \frac{\partial v_x}{\partial z}, \frac{\partial v_x}{\partial y} - \frac{\partial v_y}{\partial x} \right) . \quad (2.13c)$$

En la notación de sufijos la ecuación (2.13a) puede escribirse como:

$$N_i = \frac{dn_i}{dt} - \frac{1}{2} \left(\frac{\partial v_i}{\partial x_k} + \frac{\partial v_k}{\partial x_i} \right) n_k . \quad (2.14)$$

Con la implicación de la suma de índices **k** repetidos.

Por lo tanto, las ecuaciones (2.13b) y (2.13c) representan al elemento de rotación asociado con el corte torcional $\partial v_i / \partial x_j$, el cual no es incluido en **V**. El cambio total en la forma de un elemento cúbico de fluido, puede por tanto ser representado sistemáticamente como la suma de los dos componentes, cambio de forma y rotación, como se muestra en la figura 2.8 [18].

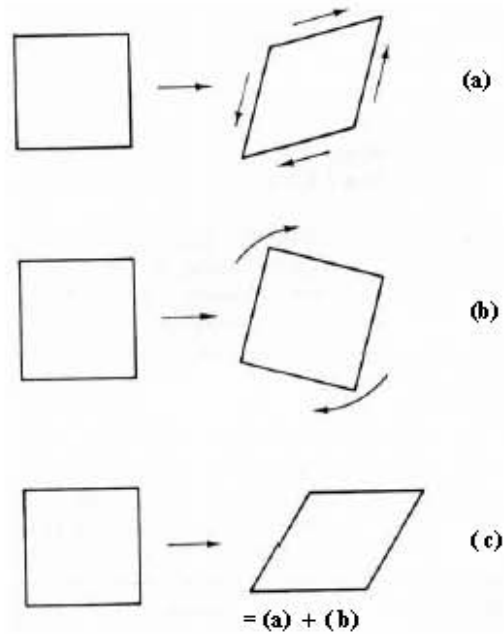


Figura 2.8. Cualquier deformación se puede representar tomando en cuenta dos componentes, uno asociado con un cambio de forma (a), el otro con una rotación (b). La suma neta de estos dos convierte a un cuadrado en un rombo girado.

De las descripciones anteriores puede observarse que de los términos implicados en la ecuación (2.8), α_2 y α_3 están asociados con flujos rotacionales y los términos α_5 y α_6 con flujos no rotacionales (sin depender de la vorticidad ω), la combinación de estos dos flujos produce un flujo de corte (figura 2.9). Podemos percatarnos, al observar la representación con notación de sufijos en la ecuación (2.8), que los cuatro términos implicados α_2 , α_3 , α_5 y α_6 son equivalentes a las diferentes maneras en las que el campo del director \mathbf{n} puede asociarse a los campos de flujo. El primer término α_1 (distinto a esos términos) es simétrico y describe el estiramiento que puede producir un flujo no rotacional [20].

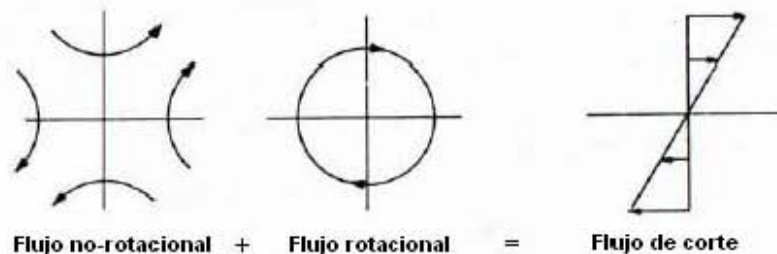


Figura 2.9. La combinación de flujo rotacional y flujo no-rotacional producen un flujo de corte.

2.7. COEFICIENTES DE LESLIE

Los valores de las viscosidades α_i 's, para una molécula nemática pequeña pueden diferir de otra por un orden de magnitud. Por consiguiente, la resistencia a fluir por parte de las moléculas del nemático depende fuertemente de la dirección del flujo y del gradiente del mismo relativo al director del nemático. En un flujo de corte, las viscosidades α_2 y α_3 determinan los momentos de torsión (torques) del director en las orientaciones mostradas en la figura 2.10b y 2.10c. Si el director es orientado en la dirección del flujo (fig. 2.10b), entonces el signo de α_3 determina la dirección de rotación; un signo negativo para α_3 provoca una rotación en sentido contrario a las manecillas del reloj. Si el director está en la dirección del gradiente de flujo (fig. 2.10c), entonces α_2 determina el torque; un valor negativo para α_2 provoca una rotación en el sentido de las manecillas del reloj. Por lo que, si α_2 y α_3 son negativos, el director rotara en el sentido de las manecillas del reloj para algunas orientaciones y en sentido contrario a las manecillas del reloj para otras [21]. Los valores de α_2 y α_3 determinan las magnitudes de los torques que actúan sobre el director, así como la gama de ángulos para los cuales la rotación ocurrirá en el sentido de las manecillas del reloj o en contra de ellas. La viscosidad α_4 no está relacionada con el torque del director, pero determina la viscosidad del fluido cuando el director está orientado en la dirección de la vorticidad [19].

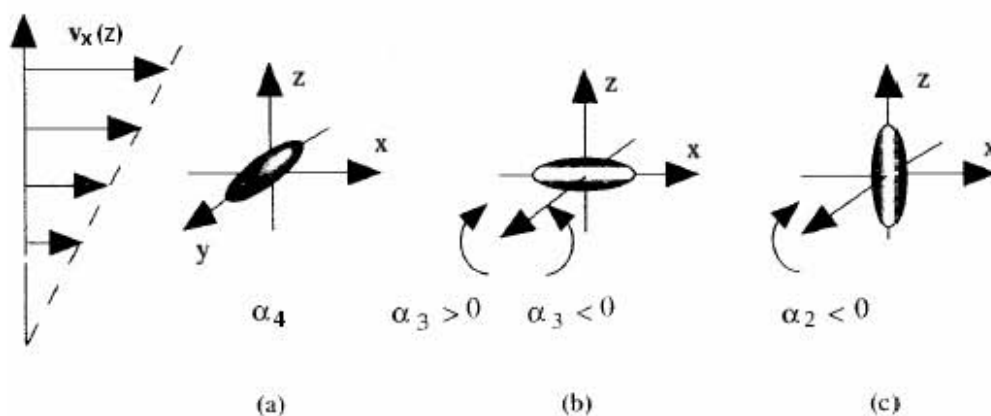


Figura 2.10. Torques viscosos actuando en el campo director en tres geometrías diferentes.

2.8. VISCOSIDADES DE MIESOWICZ.

La anisotropía de las propiedades viscosas de un fluido nemático puede ilustrarse, midiendo las viscosidades para diferentes orientaciones del director con respecto a la dirección del flujo. Las tres geometrías mas practicas de la orientación del director versus flujo de corte, se conocen como geometrías de Miesowicz [18].

Las tres viscosidades η_a , η_b y η_c , describen la viscosidad medida en un flujo de corte experimental para las tres geometrías de Miesowicz mostradas en la figura (2.11) en la cual \mathbf{n} (sujetado en una orientación determinada por un campo eléctrico o magnético lo suficientemente intenso para resistir los efectos de orientación del flujo impuesto) se encuentra paralelo u ortogonal al gradiente de velocidad [19].

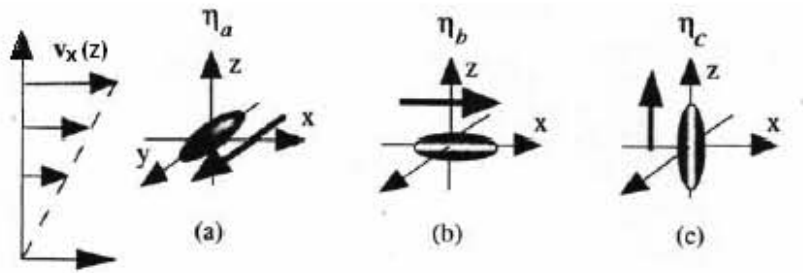


Figura 2.11. Geometrías de Miesowicz: (a) \mathbf{n} paralelo al plano y , (b) \mathbf{n} paralelo al flujo, (c) \mathbf{n} paralelo al gradiente de velocidad.

Estas tres viscosidades η_a , η_b y η_c pueden ser relacionadas con los coeficientes de Leslie de la siguiente manera [19]:

$$\eta_a = \frac{1}{2}\alpha_4 \quad \eta_b = \frac{\alpha_3 + \alpha_4 + \alpha_6}{2} \quad \eta_c = \frac{-\alpha_2 + \alpha_4 + \alpha_5}{2} \quad (2.15)$$

La medición de estas viscosidades es difícil ya que la presencia de superficies puede provocar perturbaciones en el alineamiento. Por lo que obtener la orientación uniforme requerida no es una tarea trivial [18].

CAPÍTULO 3. HIDRODINÁMICA DE UNA CELDA PLANAR – PLANAR DE CRISTAL LÍQUIDO NEMÁTICO.

En la actualidad se investiga la aplicabilidad de los cristales líquidos electrorreológicos en microsistemas, ya que no contienen partículas suspendidas, muestran ventajas intrínsecas sobre los fluidos electrorreológicos clásicos. En muchas publicaciones se trata el comportamiento de las moléculas de cristal líquido sujetas a flujos de corte o campos eléctricos pero pocos artículos describen su acción simultánea. Por ejemplo en [22] se desarrolló un modelo físico que describe el comportamiento estático y dinámico de los cristales líquidos electrorreológicos. Este modelo fue validado comparando mediciones y simulaciones en un microcanal rectangular (una celda), con configuración planar – planar y con flujo de Poiseuille. Por otra parte en [23] se presenta un modelo hidrodinámico que considera la aplicación simultánea de un campo eléctrico y un flujo de corte sobre un cristal líquido nemático polimérico confinado en una celda rectangular planar-planar. El desarrollo del modelo se hace bajo el supuesto de que las tres constantes elásticas básicas del tensor de Frank son iguales ($K_1=K_2=K_3$), lo cual no ocurrió para nuestro modelo. El sistema se estudió en su estado estacionario final, donde la orientación inducida del director ya ha ocurrido (este estado se alcanza en microsegundos), los valores de flujos manipulados fueron muy grandes, lo cual contrasta con nuestro trabajo ya que nosotros manejamos valores arbitrarios de flujo.

También en [24] se exhibe un modelo analítico que estudia la respuesta de un cristal líquido nemático polimérico confinado en una celda rectangular planar – planar, a los campos eléctricos. Se considera el efecto de una diferencia de presiones con un flujo de Poiseuille y su competencia con el campo eléctrico. Para el estado estacionario, donde la reorientación inducida ya ha tomado lugar, en este estudio también se consideraron las tres constantes elásticas iguales ($K_1=K_2=K_3$). Por otro lado en [25] se estudió el flujo de corte en celdas de cristal líquido con deformaciones elásticas usando un esquema de red tridimensional de Boltzmann que resuelve completamente las ecuaciones hidrodinámicas de Beris – Edwards. Los autores consideraron una celda de nemático torcida con alineamiento híbrido, en la cual la deformación es impuesta por el anclaje contradictorio en las fronteras. Al igual que en [25], en [26] se emplearon las simulaciones de la red de Boltzmann

para explorar el comportamiento de cristales líquidos sujetos a flujo de Poiseuille.

En conclusión podemos decir que este trabajo es diferente a todos los citados anteriormente, ya que por ejemplo en ninguno de ellos se consideraron las tres constantes elásticas diferentes como lo hacemos nosotros ($K_1 \neq K_2 \neq K_3$), además nosotros no contemplamos el efecto de una diferencia de presiones con un flujo de Poiseuille como lo hacen en [22 – 25]. Algo importante es el hecho de que tomamos en cuenta la aplicación simultánea de un campo eléctrico y un esfuerzo de corte, lo cual no fue así en [24 – 26]. Por todo lo anterior nuestros cálculos numéricos fueron realizados con suposiciones diferentes a las hechas por las referencias antes mencionadas.

3.1. MODELO DE LA CELDA PLANAR – PLANAR

Considérese un cristal líquido nemático del tipo calamítico (con las moléculas en forma de varilla o bastón), confinado dentro de una celda planar – planar, esto es, con un alineamiento molecular homogéneo (alineamiento paralelo a la superficie) tanto en la placa inferior como en la superior de la celda. Además considérese que el cristal líquido se encuentra en equilibrio térmico a temperatura ambiente y en estado estacionario. Es importante mencionar que sin aplicar excitaciones externas, el director \mathbf{n} del cristal líquido tendría una orientación homogénea constante a lo largo de la celda.

Con la finalidad de analizar la variación de la orientación del nemático, consideramos una celda de espesor l y ancho $L \gg l$, con un sistema de referencia cuyo origen coincide con el centro de la celda, en donde el eje "z" es perpendicular a las placas y el eje "x" paralelo a las mismas (Fig.3.1). Para describir la orientación exacta de las moléculas del cristal líquido, se designa un ángulo $\theta(z)$ formado entre el eje z y el vector director \mathbf{n} . Debido a que $L \gg l$, es razonable suponer que la orientación del director ocurre solamente en el plano x – z. Además la celda esta bajo la acción de un campo eléctrico perpendicular de baja frecuencia.

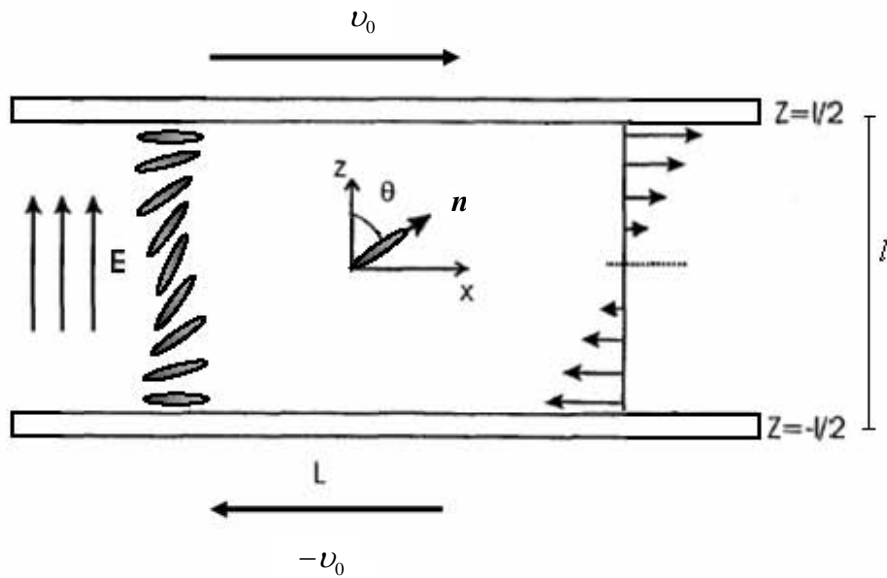


Figura.3.1 Representación de una celda de cristal líquido nemático planar – planar.

3.2 ECUACIONES Y MODELOS GOBERNANTES

Bajo las condiciones antes mencionadas, la configuración del director es espacialmente homogénea a lo largo de las direcciones "x" y "y", de esta forma las coordenadas de director dependen únicamente del valor de la coordenada "z" en la molécula nemática:

$$\mathbf{n} = (\sin \theta(z), 0, \cos \theta(z)), \quad (3.1)$$

donde $\theta(z)$ es el ángulo orientacional definido con respecto al eje z, como se muestra en la figura 3.1.

Además del campo eléctrico, consideramos que las placas pueden moverse una respecto a la otra para producir un flujo de corte en el plano x – z y a lo largo de la dirección x (ver fig.3.1). Entonces, la única componente del campo de velocidades es v_x , así que:

$$\mathbf{v} = [v_x(z), 0, 0], \quad (3.2)$$

el cual satisface las condiciones de frontera de "non-slip":

$$v_x(z = \pm l/2) = \pm v_0 . \quad (3.3)$$

Se han identificado varios momentos de torsión (torques) que actúan en el cambio de orientación de las moléculas de un cristal líquido confinadas entre dos placas infinitas, los de mayor influencia son:

3.2.1 Torque debido al flujo de corte aplicado

La forma de "bastón" de las moléculas del cristal líquido tiene una implicación en el comportamiento del flujo del mismo, se presenta un momento que provoca un giro en ellas en casi todo el espesor del cristal líquido, con excepción de las capas dispuestas cerca de las paredes de la celda en donde las moléculas permanecen pegadas a éstas sin modificar su posición. Una aproximación común para describir este flujo es establecida por Ericksen, Leslie y Parodi (teoría ELP). Debido a las propiedades anisotrópicas de los cristales líquidos, la teoría ELP describe el flujo de éstos mediante un tensor de esfuerzos σ_{ij} , el director \mathbf{n} y los coeficientes de viscosidad de Leslie α_1 a α_6 como se describe en la siguiente ecuación [22]:

$$\begin{aligned} \sigma_{ij} = & \alpha_1 n_i n_j V_{kp} n_k n_p + \alpha_2 n_j N_i + \alpha_3 n_i N_j + \alpha_4 V_{ij} + \alpha_5 n_j V_{ik} n_k \\ & + \alpha_6 n_i V_{jk} n_k, \end{aligned} \quad (3.4)$$

donde

$$V_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial v_i}{\partial x_j} + \frac{\partial v_j}{\partial x_i} \right) , \quad (3.5)$$

$$N_i = \frac{dn_i}{dt} - \frac{1}{2} \left(\frac{\partial v_i}{\partial x_j} + \frac{\partial v_j}{\partial x_i} \right) n_j . \quad (3.6)$$

En estas ecuaciones v_i , v_j son las componentes del vector velocidad \mathbf{v} , V_{ij} es la parte simétrica del tensor de gradiente de velocidad, N_i es la rotación del director relativa al fluido y x_i es una coordenada cartesiana. Es importante hacer notar que sólo cinco de los seis coeficientes de

Leslie son linealmente independientes, puesto que uno de ellos se relaciona mediante la ecuación de Parodi:

$$\alpha_2 + \alpha_3 = \alpha_6 - \alpha_5 . \quad (3.7)$$

De la teoría "ELP", podemos deducir que el torque T_v en una molécula debido al flujo de corte está determinado por [22]:

$$\mathbf{T}_v = \mathbf{n} \times \left(\left(\frac{\alpha_3 - \alpha_2}{2} (\nabla \times \mathbf{v}) \right) \times \mathbf{n} - (\alpha_6 - \alpha_5) \mathbf{V} \cdot \mathbf{n} \right). \quad (3.8)$$

Este torque es ilustrado en la figura 3.2, en donde las coordenadas del director están escritas como $\mathbf{n} = (\sin \theta(z), 0, \cos \theta(z))$. Sustituyendo éstos componentes en la ec. (3.8), el torque cortante que actúa en una molécula nemática puede expresarse como [22]:

$$T_v = (\alpha_3 \sin^2 \theta - \alpha_2 \cos^2 \theta) \frac{d\theta}{dz} . \quad (3.9)$$

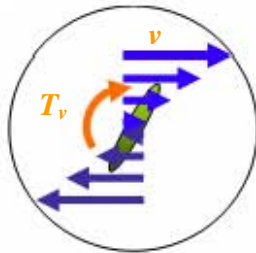


Figura3.2. Torque en el nemático producto del flujo de corte.

Varios investigadores consideran que la contribución del coeficiente α_3 es despreciable, pero en este estudio sí se tomará en cuenta.

3.2.2 Torque en la molécula debido al campo eléctrico

Una segunda fuerza que actúa sobre las moléculas del cristal líquido nemático es generada por la presencia de un campo eléctrico. Al aplicar un campo eléctrico en el nemático, se induce un dipolo eléctrico en la molécula y la hace girar, por lo anterior el vector director sufre una reorientación debido a que éste intenta alinearse en la dirección del

campo eléctrico. El momento de torsión inducido por este campo está descrito por [22]:

$$T_{el} = -\frac{\epsilon_a \cdot \epsilon_0}{2} E^2 \sin(2\theta), \quad (3.10)$$

Donde ϵ_0 la permitividad dieléctrica del vacío y $\epsilon_a = \epsilon_{||} - \epsilon_{\perp}$ la anisotropía dieléctrica del cristal líquido, siendo $\epsilon_{||}$ y ϵ_{\perp} las constantes dieléctricas paralela y perpendicular del cristal líquido respectivamente.

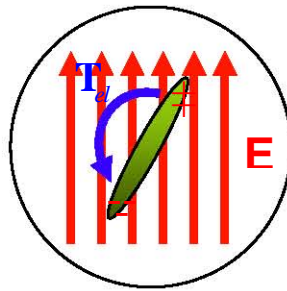


Figura 3.3 Torque en el nemático producto de un campo eléctrico.

3.2.3 Torque en la molécula debido a las propiedades elásticas

A diferencia de los líquidos ideales, los cristales líquidos muestran propiedades elásticas similares a los materiales sólidos. El momento de torsión generado debido a estas propiedades elásticas es tomado en cuenta por las constantes elásticas de Frank (K_i). Generalmente, la energía libre de distorsión debido a fuerzas elásticas puede describirse por [22]:

$$F_e = \frac{1}{2} K_1 (\nabla \cdot \mathbf{n})^2 + \frac{1}{2} K_2 (\mathbf{n} \cdot \nabla \times \mathbf{n})^2 + \frac{1}{2} K_3 (\mathbf{n} \times \nabla \times \mathbf{n})^2, \quad (3.11)$$

Donde K_1 , K_2 y K_3 son las tres constantes elásticas, que corresponden a los tres tipos fundamentales de deformación en un cristal líquido nemático: la apertura (splay), torsión (twist), y pandeamiento (bend) respectivamente. Teniendo en cuenta que en éste estudio no existen fuerzas que provoquen una torsión en la molécula nemática, de la ec. (3.11), se deriva el torque elástico quedando como:

$$T_e = (K_1 \text{sen}^2 \theta + K_3 \text{cos}^2 \theta) \frac{d^2 \theta}{dz^2} + (K_1 - K_3) \text{sen} \theta \text{cos} \theta \left(\frac{d\theta}{dz} \right)^2. \quad (3.12)$$

3.2.4 Torque dinámico

En el caso de situaciones dinámicas, un torque debido a la inercia rotacional y un torque debido al amortiguamiento viscoso deben ser tomados en cuenta, quedando la siguiente expresión [22]:

$$T_{dyn} = I \frac{d^2 \theta}{dt^2} + \gamma \frac{d\theta}{dt}, \quad (3.13)$$

donde I es la inercia rotacional, γ el amortiguamiento viscoso rotacional y t el tiempo.

3.2.5 Equilibrio de la suma de torques

La configuración de equilibrio se obtiene de la suma de los momentos de torsión (torques) descritos anteriormente, dando como resultado una ecuación diferencial no lineal de segundo orden:

$$\begin{aligned} I \frac{d^2 \theta}{dt^2} + \gamma \frac{d\theta}{dt} &= (K_1 \text{sen}^2 \theta + K_3 \text{cos}^2 \theta) \frac{d^2 \theta}{dz^2} \\ &+ (K_1 - K_3) \text{sen} \theta \text{cos} \theta \left(\frac{d\theta}{dz} \right)^2 \\ &+ [\alpha_3 \text{sen}^2 \theta - \alpha_2 \text{cos}^2 \theta] \frac{dv}{dz} - \frac{\epsilon_a \cdot \epsilon_0}{2} \cdot E^2 \cdot \text{sen}(2\theta). \end{aligned} \quad (3.14)$$

Un último torque importante que actúa sobre las moléculas es causado por la interacción entre las moléculas de cristal líquido y las paredes de la celda. 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 ecuación (3.14), las cuales serán:

$$\theta(z = -l/2) = \pi/2, \quad \theta(z = l/2) = \pi/2. \quad (3.15)$$

3.3 DEDUCCIÓN DE LA ECUACIÓN DE CONSERVACIÓN DEL MOMENTO LINEAL.

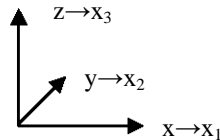
Debido a que en la ec. (3.14), tenemos el término de la variación de la velocidad con respecto al eje z (dv/dz), es necesario obtener una ecuación de conservación de momento lineal para que este término desaparezca de la ecuación y la solución de la ecuación se facilite. Para hacer esto partimos de la ecuación de momentum en ausencia de fuerzas externas para medios continuos, la cual es [19]:

$$\frac{\partial \rho v_i}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial x_j} (-\sigma_{ij} + \rho v_i v_j) \quad (3.16.1)$$

$$\frac{\partial \rho v_i}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x_j} \sigma_{ij} - \frac{\partial}{\partial x_j} \rho v_i v_j \quad (3.16.2)$$

donde ρv_i es la densidad de momentum y $(-\sigma_{ij} + \rho v_i v_j)$ es el flujo tensorial de momentum, también conocido como tensor ordinario de momentum.

Con la finalidad de desarrollar y evaluar cada uno de los elementos que componen la ecuación anterior, tomaremos como referencia la siguiente notación de coordenadas:



El lado izquierdo de la igualdad en la ecuación (3.16.2), se hace cero ya que en nuestro estudio sólo nos interesa el estado estacionario, y no el que cambia con respecto al tiempo.

Evaluando $\rho \frac{\partial v_i v_j}{\partial x_j}$

$$\rho \frac{\partial v_i v_j}{\partial x_j} = \rho \frac{\partial v_i v_1}{\partial x_1} + \rho \frac{\partial v_i v_2}{\partial x_2} + \rho \frac{\partial v_i v_3}{\partial x_3} . \quad (3.17)$$

El primer término de esta expresión se vuelve cero porque la velocidad no cambia en la coordenada x_1 , el segundo término también se vuelve cero porque el vector velocidad v no tiene componentes en v_2 , igualmente el tercer término se hace cero debido a que el vector velocidad no tiene componentes en v_3 . Así que:

$$\rho \frac{\partial v_i v_j}{\partial x_j} = 0 \quad (3.18)$$

Ahora solo falta evaluar $\frac{\partial}{\partial x_j} \sigma_{ij}$, considerando que el vector velocidad solo tiene componentes en la coordenada x_1 y que varía con respecto a la coordenada x_3 , la evaluación se reduce a obtener $\frac{\partial}{\partial x_3} \sigma_{13}$, para esto primeramente desarrollaremos σ_{13} , basándonos en la ec. (3.4):

$$\begin{aligned} \sigma_{13} = & \alpha_1 n_1 n_3 [V_{11} n_1 n_1 + V_{12} n_1 n_2 + V_{13} n_1 n_3 + V_{21} n_2 n_1 + V_{22} n_2 n_2 + V_{23} n_2 n_3 \\ & + V_{31} n_3 n_1 + V_{32} n_3 n_2 + V_{33} n_3 n_3] + \alpha_2 n_3 N_1 + \alpha_3 n_1 N_3 + \alpha_4 V_{13} \\ & + \alpha_5 n_3 [V_{11} n_1 + V_{12} n_2 + V_{13} n_3] + \alpha_6 n_1 [V_{31} n_1 + V_{32} n_2 + V_{33} n_3] . \end{aligned} \quad (3.19)$$

Desarrollando las V_{ij} , con la ayuda de la ec. (3.5), considerando que el vector velocidad solo tiene componente en la coordenada x_1 y que además solo varía con respecto a la coordenada x_3 , resulta lo siguiente:

$$V_{11} = V_{12} = V_{22} = V_{21} = V_{23} = V_{33} = V_{32} = 0 \quad (3.20)$$

$$V_{13} = V_{31} = \frac{1}{2} \frac{dv_1}{dx_3} . \quad (3.21)$$

Ahora desarrollando N_i , basándonos en la ec (3.6), tomando en cuenta las mismas consideraciones que en el desarrollo de las V_{ij} y despreciando el término que depende del tiempo (ya que solo nos interesa el régimen estacionario), obtenemos lo siguiente:

$$N_1 = -\frac{1}{2} \frac{dv_1}{dx_3} n_3 \quad (3.22)$$

$$N_3 = \frac{1}{2} \frac{dv_1}{dx_3} n_1 \quad (3.23)$$

Sustituyendo la V_{13} , N_1 , N_3 y las componentes del vector director en la ecuación (3.19), la expresión se reduce a:

$$\begin{aligned} \sigma_{13} = & \alpha_1 \operatorname{sen}^2 \theta \cos^2 \theta \frac{dv_1}{dx_3} - \frac{\alpha_2}{2} \cos^2 \theta \frac{dv_1}{dx_3} + \frac{\alpha_3}{2} \operatorname{sen}^2 \theta \frac{dv_1}{dx_3} + \frac{\alpha_4}{2} \cos^2 \theta \frac{dv_1}{dx_3} \\ & + \frac{\alpha_4}{2} \operatorname{sen}^2 \theta \frac{dv_1}{dx_3} + \frac{\alpha_5}{2} \cos^2 \theta \frac{dv_1}{dx_3} + \frac{\alpha_6}{2} \operatorname{sen}^2 \theta \frac{dv_1}{dx_3} . \end{aligned} \quad (3.24)$$

Simplificando la ecuación anterior, obtenemos:

$$\sigma_{13} = \alpha_1 \operatorname{sen}^2 \theta \cos^2 \theta \frac{dv_1}{dx_3} + \frac{(\alpha_3 + \alpha_4 + \alpha_6)}{2} \operatorname{sen}^2 \theta \frac{dv_1}{dx_3} + \frac{(-\alpha_2 + \alpha_4 + \alpha_5)}{2} \cos^2 \theta \frac{dv_1}{dx_3} . \quad (3.25)$$

Tomando en cuenta las viscosidades de Miesowicz, $\eta_b = (\alpha_3 + \alpha_4 + \alpha_6)/2$ y $\eta_c = (\alpha_4 + \alpha_5 - \alpha_2)/2$, la expresión toma la forma:

$$\sigma_{13} = \alpha_1 \operatorname{sen}^2 \theta \cos^2 \theta \frac{dv_1}{dx_3} + \eta_b \operatorname{sen}^2 \theta \frac{dv_1}{dx_3} + \eta_c \cos^2 \theta \frac{dv_1}{dx_3} . \quad (3.26)$$

Podemos definir una viscosidad del nemático que depende de la posición dada por:

$$\eta(\theta) = \alpha_1 \operatorname{sen}^2 \theta \cos^2 \theta + \eta_b \operatorname{sen}^2 \theta + \eta_c \cos^2 \theta , \quad (3.27)$$

donde $\eta(\theta)$ es la viscosidad del cristal líquido que depende de la posición. En esta ecuación, $\eta_b = (\alpha_3 + \alpha_4 + \alpha_6)/2$ y $\eta_c = (\alpha_4 + \alpha_5 - \alpha_2)/2$ son dos de las tres viscosidades de Miesowicz.

Sustituyendo la ec. (3.27) en la ec. (3.26), la expresión se reduce a:

$$\sigma_{13} = \eta(\theta) \frac{dv_1}{dx_3} . \quad (3.28)$$

Finalmente derivamos σ_{13} , con respecto a la coordenada x_3 para obtener:

$$\frac{d\sigma_{13}}{dx_3} = \frac{d}{dx_3} \left[\eta(\theta) \frac{dv_1}{dx_3} \right] = 0 . \quad (3.29)$$

La ecuación (3.29) es la ecuación de conservación de momento lineal para nuestro sistema de estudio. Regresando al sistema de coordenadas que se definió inicialmente ($x = x_1$, $y = x_2$, $z = x_3$) la ecuación queda:

$$\frac{d}{dz} \left[\eta(\theta) \frac{dv_x}{dz} \right] = 0 . \quad (3.30)$$

La ecuación (3.14) se complementa con la ecuación de conservación de momento lineal ec. (3.30).

3.4. MÉTODO DE SOLUCIÓN

En la sección anterior presentamos un modelo que describe el comportamiento dinámico del alineamiento planar-planar de un cristal líquido nemático en una celda, por medio de las ecuaciones (3.14) y (3.30). Sin embargo, en este trabajo sólo estamos interesados en el estado estacionario final del sistema. Por lo tanto, el problema consiste en resolver el sistema de ecuaciones diferenciales simultáneas en el régimen de estado estacionario. Para este propósito primero se definirán las variables normalizadas $\zeta \equiv z/l$ y $\tilde{v}_x \equiv v_x/|v_0|$, ahora haciendo uso de la regla de la cadena obtendremos sus respectivas derivadas:

$$\frac{d\theta}{dz} = \frac{1}{l} \frac{d\theta}{d\zeta}, \quad \frac{d^2\theta}{dz^2} = \frac{1}{l^2} \frac{d^2\theta}{d\zeta^2} \quad (3.31)$$

$$\frac{dv_x}{dz} = \frac{1}{l} \frac{dv_x}{d\zeta}, \quad \frac{dv_x}{dz} = \frac{|v_0|}{l} \frac{d\tilde{v}_x}{d\zeta}. \quad (3.32)$$

Sustituyendo estas derivadas y considerando que sólo nos interesa el régimen estacionario del sistema la ecuación (3.14) se reduce a:

$$\begin{aligned} & \frac{1}{l^2} (K_1 \operatorname{sen}^2 \theta + K_3 \operatorname{cos}^2 \theta) \frac{d^2\theta}{d\zeta^2} + \frac{1}{l^2} (K_1 - K_3) \operatorname{sen} \theta \operatorname{cos} \theta \left(\frac{d\theta}{d\zeta} \right)^2 \\ & + [\alpha_3 \operatorname{sen}^2 \theta + \alpha_2 \operatorname{cos}^2 \theta] \frac{|v_0|}{l} \frac{d\tilde{v}_x}{d\zeta} - \frac{\varepsilon_a \varepsilon_0}{2} E^2 \operatorname{sen} (2\theta) = 0 \quad . \end{aligned} \quad (3.33)$$

De forma semejante, después de integrar la ecuación (3.30), ésta se reduce a:

$$\frac{d\tilde{v}_x}{d\zeta} = \operatorname{sign}(v_0) \frac{c}{\eta(\theta)} \quad (3.34)$$

Con $\operatorname{sign}(v_0)$ la función signo y $c(q,m)$ una constante de integración positiva que depende solo del campo eléctrico y el flujo de corte aplicados, dada por:

$$c(q,m) = \frac{2}{\int_{-1/2}^{1/2} \frac{d\zeta''}{\eta[\theta(\zeta'')]}} \quad (3.35)$$

Las condiciones de frontera en términos de las variables normalizadas toman la forma:

$$\theta(\zeta = -1/2) = \pi/2, \quad \theta(\zeta = 1/2) = \pi/2 \quad (3.36)$$

y

$$\tilde{v}_x(\zeta = \pm 1/2) = \pm \text{sign}(v_0) \quad (3.37)$$

Debido a que las constantes elásticas no se consideraron iguales ($K_1 \neq K_2 \neq K_3$), se tiene que realizar unos arreglos en la ecuación (3.33) para poder trabajarla, por lo anterior definimos $\kappa \equiv K_3/K_1$, factorizamos K_1 , y la sustituimos en la ecuación (3.34), es así como (3.33) se reduce a:

$$\begin{aligned} & \frac{K_1}{l^2} (\text{sen}^2 \theta + \kappa \text{cos}^2 \theta) \frac{d^2 \theta}{d\zeta^2} + \frac{K_1}{l^2} (1 - \kappa) \text{sen} \theta \cos \theta \left(\frac{d\theta}{d\zeta} \right)^2 \\ & + [\alpha_3 \text{sen}^2 \theta + \alpha_2 \text{cos}^2 \theta] \frac{|v_0|}{l} \frac{\text{sign}(v_0)c}{\eta(\theta)} - \frac{\varepsilon_a \varepsilon_0}{2} E^2 \text{sen}(2\theta) = 0. \end{aligned} \quad (3.38)$$

Ahora multiplicando (3.21) por l^2/K_1 , se obtiene:

$$\begin{aligned} & (\text{sen}^2 \theta + \kappa \text{cos}^2 \theta) \frac{d^2 \theta}{d\zeta^2} + (1 - \kappa) \text{sen} \theta \cos \theta \left(\frac{d\theta}{d\zeta} \right)^2 \\ & + \frac{m}{\eta(\theta)} [\alpha_3 \text{sen}^2 \theta + \alpha_2 \text{cos}^2 \theta] - q \text{sen}(2\theta) = 0, \end{aligned} \quad (3.39)$$

donde se ha definido un parámetro adimensional:

$$q \equiv \frac{\varepsilon_a \varepsilon_0}{2K_1} l^2 E^2, \quad (3.40)$$

y el flujo de corte adimensional:

$$m \equiv \frac{l v_0 c(q, m)}{K_1} \quad (3.41)$$

Nótese que "q" toma solo valores positivos mientras "m" es positiva si la placa superior de la celda se mueve a la derecha y negativa si se mueve a la izquierda. Además, nótese que m y v₀ no están relacionados linealmente debido al factor c(q, m). Finalmente, la ecuación (3.39), puede ser resuelta numéricamente empleando el método "shooting" para obtener la configuración estacionaria del director del nemático.

3.5. DESCRIPCIÓN DEL MÉTODO NUMÉRICO A UTILIZAR ("SHOOTING")

Para obtener la configuración estacionaria del director, debemos resolver la ecuación diferencial (3.39), la cual es de segundo orden y no lineal, utilizando las condiciones de frontera (correspondientes a la celda planar- planar) en lugar de condiciones iniciales. La solución tendrá que ser obtenida de forma numérica mediante una variante del método "shooting", o mejor conocido como método de prueba y error. Este método reduce la solución de la ecuación con condiciones de frontera igual a:

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

donde "α" y "t" vendrían siendo los valores de los ángulos en las placas inferior y superior respectivamente.

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 calcula numéricamente.

Para encontrar el valor de " β " adecuado, se sigue la siguiente metodología: como en un principio conocemos la condición $\theta(a)=\alpha$, proporcionamos un valor inicial " β_1 " en $\theta'(a)=\beta_1$, enseguida con este valor dado procedemos a calcular la pendiente de una tangente que cumpla con $\theta(b)=t$ (Fig. 3.4). Integrando numéricamente de "a" a "b", empleando alguno de los muchos procedimientos que existen para estos casos, obtenemos δ_1 [27].

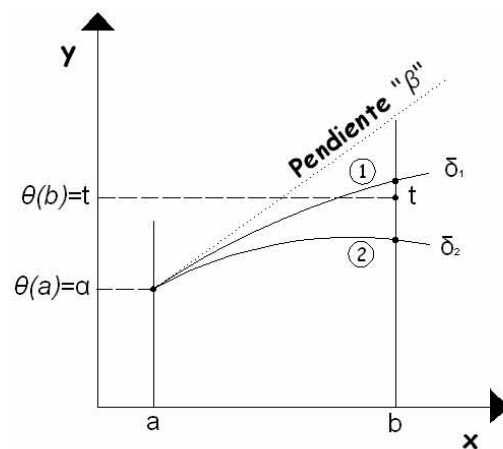


Figura 3.4 Solución por método "shooting" de un problema con condiciones de frontera.

En el método "shooting" habitual, si el valor inicial proporcionado " β_1 " no cumple las condiciones de frontera esperadas $\theta(b)=t$, se elige un segundo valor " β_2 " y si este tampoco satisface las condiciones de frontera, entonces, se interpolan δ_1 y δ_2 para obtener " β_3 ", este procedimiento se repite una y otra vez hasta encontrar el valor " β_x " que satisfaga tanto como queramos la condición de frontera deseada. Sin embargo como mencionamos en un principio realizaríamos una pequeña variación a este método, la cual consiste en asignar un intervalo de valores iniciales $\beta_{min} \leq \beta \leq \beta_{max}$, obtener numéricamente la integral de "a" a "b" para cada uno de los datos dados y así encontrar una tabla de puntos $\delta_{min} \leq \delta \leq \delta_{max}$. Después, interpolamos los valores de dicha tabla con el objeto de asegurar que algún " δ_x " cruce con el punto "t" y que cumpla la condición $\theta(b)=t$, y de esta forma encontrar el valor de la condición " β " buscada. Por cuestiones de facilidad y exactitud en el calculo de " β ", graficamos los datos obtenidos de la tabla $\delta_{min} \leq \delta \leq \delta_{max}$ vs. el valor del ángulo " θ ", que resulta de resolver con " δ_x " la ec.(3.39)

para un flujo y un campo eléctrico determinados. De la grafica se selecciona el valor " β " que cumple la configuración $\theta(z=1/2)= 90^\circ$ que corresponde a la condición de frontera que queremos.

Con la finalidad de realizar este proceso de una forma ágil y rápida, realizamos un programa que repite de forma automática la metodología antes mencionada, para ello, empleamos el programa "*Mathematica*" y de esta forma encontramos la condición para distintos valores de las constantes q, m; con lo cual queda resuelta la ecuación (3.39), respetando las condiciones de frontera de una celda planar – planar.

CAPÍTULO 4. RESULTADOS

Comenzaremos diciendo que para nuestro problema (la resolución de la ecuación (3.39)), existen varias soluciones, en los intervalos utilizados de "m" y "q" ($0 \leq q \leq 10$, $-20 \leq m \leq 20$). Se presentan tres casos particulares, el primero se ilustra en la figura 4.1, la cual es una grafica que nos muestra que valor de " β " cumple la configuración $\theta(z=1/2)=90^\circ$ que corresponde a la condición de frontera de la placa superior de la celda¹. En esta figura observamos que existe una sola raíz, la cual es la solución a nuestra ecuación diferencial.

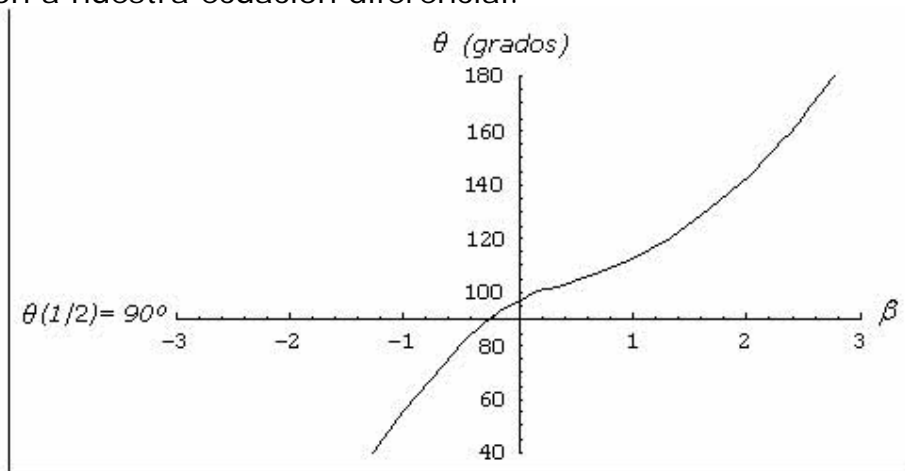


Figura 4.1 Gráfica de " β " vs " $\theta(z=1/2)=90^\circ$ " con una sola raíz.

El segundo caso lo presentamos en la figura 4.2, esta figura al igual que la 4.1 es una grafica que nos muestra que valores de " β " cumplen con la condición de frontera de la placa superior, sólo que en esta grafica podemos ver que simultáneamente existen dos raíces, las cuales son las soluciones para nuestra ecuación diferencial.

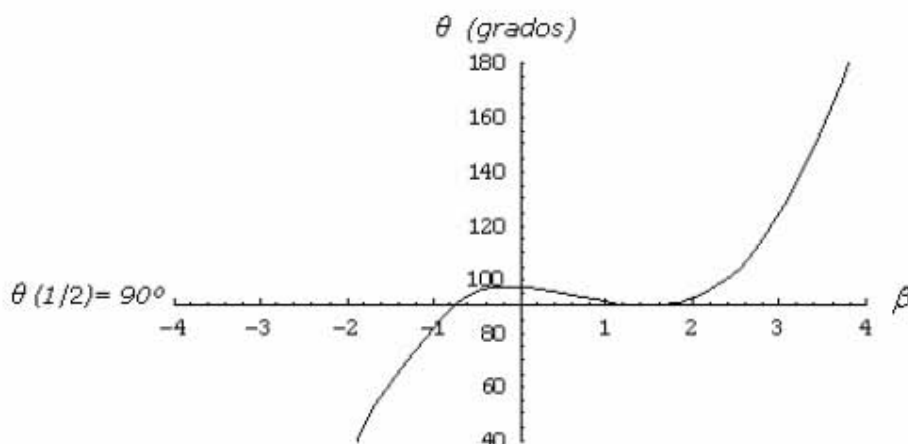


Figura 4.2 Gráfica de " β " vs " $\theta(z=1/2)=90^\circ$ " con 2 raíces.

¹ Ver sección 3.5

Finalmente el tercer caso lo mostramos en la figura 4.3, esta figura al igual que la 4.1 y 4.2 es una grafica que nos muestra que valores de " β " cumplen con la condición de frontera de la placa superior, pero aquí ya no sólo existen dos raíces, sino tres, las cuales resuelven nuestra ecuación diferencial. Es de suma importancia mencionar que la segunda raíz no la tomamos en cuenta debido a que su energía libre es demasiado grande (lo cual no esta de acuerdo con la termodinámica, que nos dice que los sistemas en equilibrio adoptan su estado de mínima energía libre), y por esta razón es muy inestable, esto quiere decir que cualquier perturbación por mínima que sea provocaría que esta raíz se convirtiera en cualquiera de las otras dos y no funcionara como una solución nueva para nuestro problema.

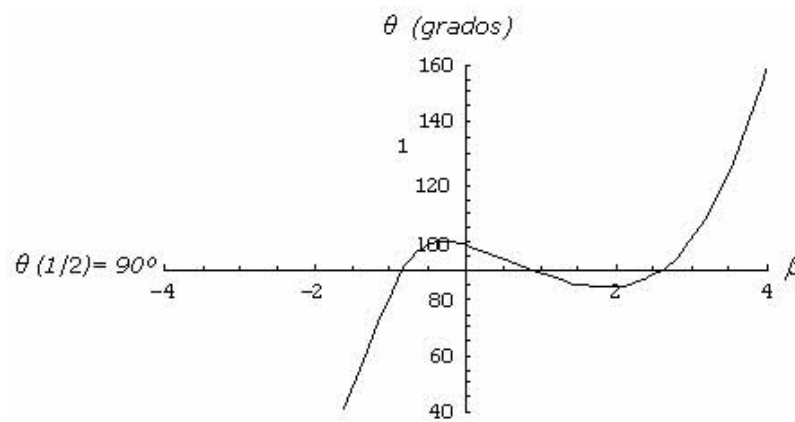


Figura 4.3 Gráfica de " β " vs " $\theta (z=1/2)=90^\circ$ " con tres raíces.

Los tres casos antes expuestos se resumen en la figura 4.4 donde mostramos un diagrama de fases de m vs q (flujo vs campo eléctrico), en el cual observamos claramente la región en la cual existe una solución única y la región en la cual existen varias soluciones para la ecuación (3.39):

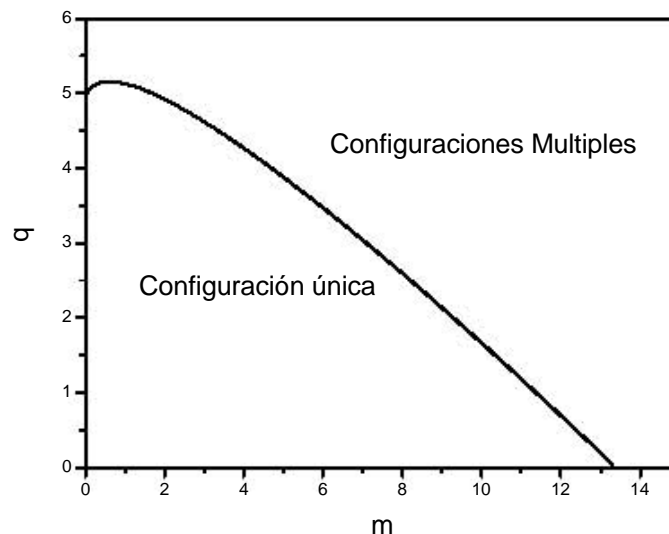


Figura 4.4. Diagrama de fases para nuestro problema.

Observando el diagrama anterior nos damos cuenta de la presencia de la conocida *transición de Freedericksz* toma lugar alrededor de $q_c \approx 4.96$. Esto nos permite saber que valores de q tendrán una influencia importante en la alineación de las moléculas del cristal líquido nemático. Esta curva puede considerarse como una generalización de la transición de Freedericksz para flujos arbitrarios.

A continuación, los cálculos numéricos son desarrollados para 4'-n-pentil-4-cianobifenil (5CB). Los coeficientes de Leslie para este cristal líquido a $T = 25^\circ\text{C}$ son: $\alpha_1 = -0.0060$ Pa-s, $\alpha_2 = -0.0812$ Pa-s, $\alpha_3 = -0.0036$ Pa-s, $\alpha_4 = 0.0652$ Pa-s, $\alpha_5 = 0.0640$ Pa-s, $\alpha_6 = -0.0208$ Pa-s, y la relación entre las constantes elásticas es $\kappa \equiv K_3 / K_1 = 1.316$.

4.1. CONFIGURACIÓN DEL DIRECTOR DEL NEMÁTICO

Consideraremos primero el perfil orientacional. En la figura (4.5) graficamos el ángulo orientacional θ vs. ζ , obtenidos de la ec. (3.39), para los casos de (a) $q=2$ y (b) $q=10$. En el panel (b) consideramos un q grande lo cual causa que las moléculas tiendan a alinearse verticalmente en un principio, no obstante observamos que el ángulo θ crece conforme se incrementa el valor de m , para $m > 0$ (alcanzando su máxima inclinación en el centro de la celda). Esto quiere decir que las moléculas tienden a alinearse con la dirección del flujo. Sin embargo, incluso para flujos muy grandes esta alineación no es perfecta debido a la presencia del término con α_3 en la ec. (3.39). De hecho, para flujos muy grandes la ec. (3.39) tiende asintóticamente a un valor máximo posible del ángulo orientacional:

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

el cual para los parámetros considerados es $\theta_{\max} \approx 78.11^\circ$.

Por otro lado, en el panel (a) consideramos un $q=2$ menor al crítico ($q_c=4.96$), donde observamos que conforme aumenta m el ángulo tiende a disminuir en lugar de aumentar. En este panel observamos que cuando $m=0$ las moléculas permanecen en su configuración inicial (paralelas a las placas, es decir, tienen un ángulo de 90°), a pesar de que existe un campo eléctrico perpendicular a ellas, esto es porque la

magnitud del campo no es la suficiente como para influir en su alineamiento. Además podemos observar que su máxima inclinación se encuentra en el centro de la celda.

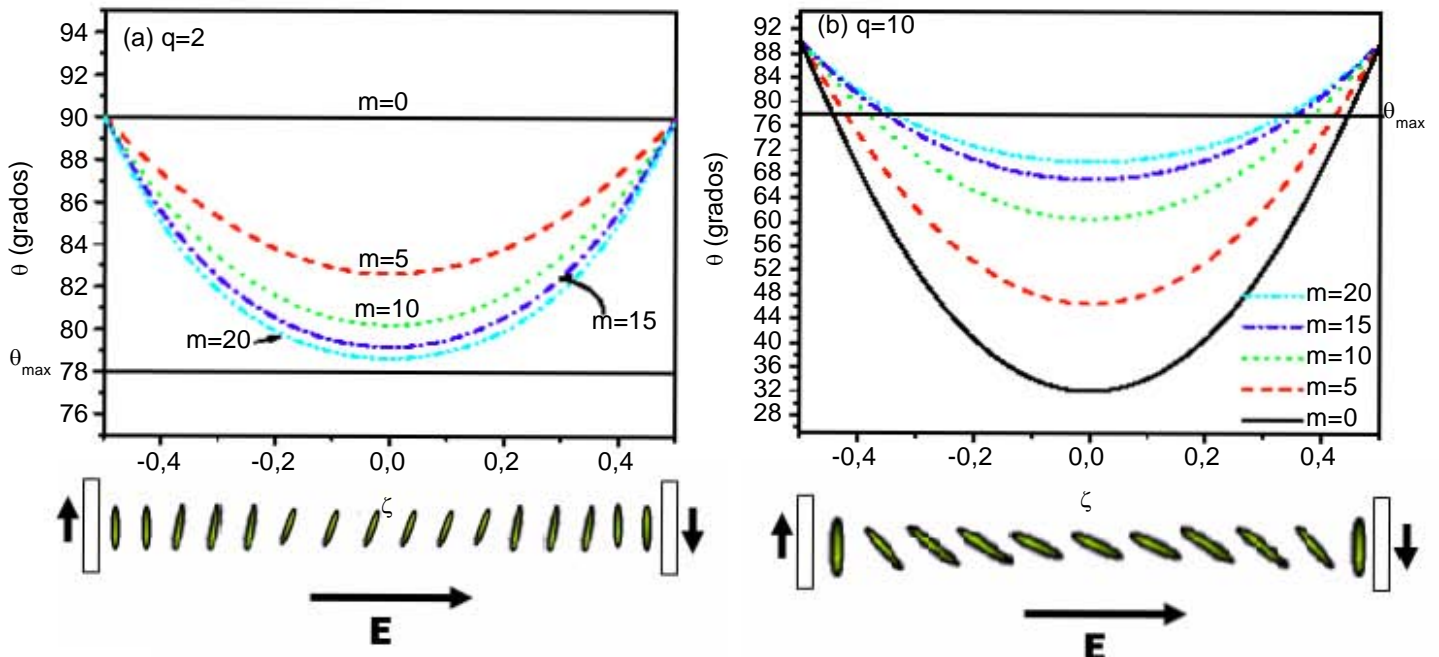


Figura 4.5. Orientación del director para diferentes valores de m con q fija.

En contraste, en la figura 4.6 se observa que el ángulo θ decrece conforme se incrementa el valor de q , para un valor dado de m . Esto coincide con la tendencia de las moléculas de ser alineadas con la dirección del campo eléctrico. En el panel (a), podemos ver que cuando $q=0, 2, 4$, la configuración de las moléculas no sufre cambio alguno, esto es porque esos valores están por debajo del campo crítico ($q_c=4.96$) y por lo tanto no son lo suficientemente intensos para influir en el alineamiento de las moléculas del nemático. Por otro lado, en el panel (b), observamos que las moléculas desde un principio ya cuentan con un ángulo de orientación distinto de cero. Esto se debe a que en este caso se encuentra presente un flujo fijo de $m=20$.

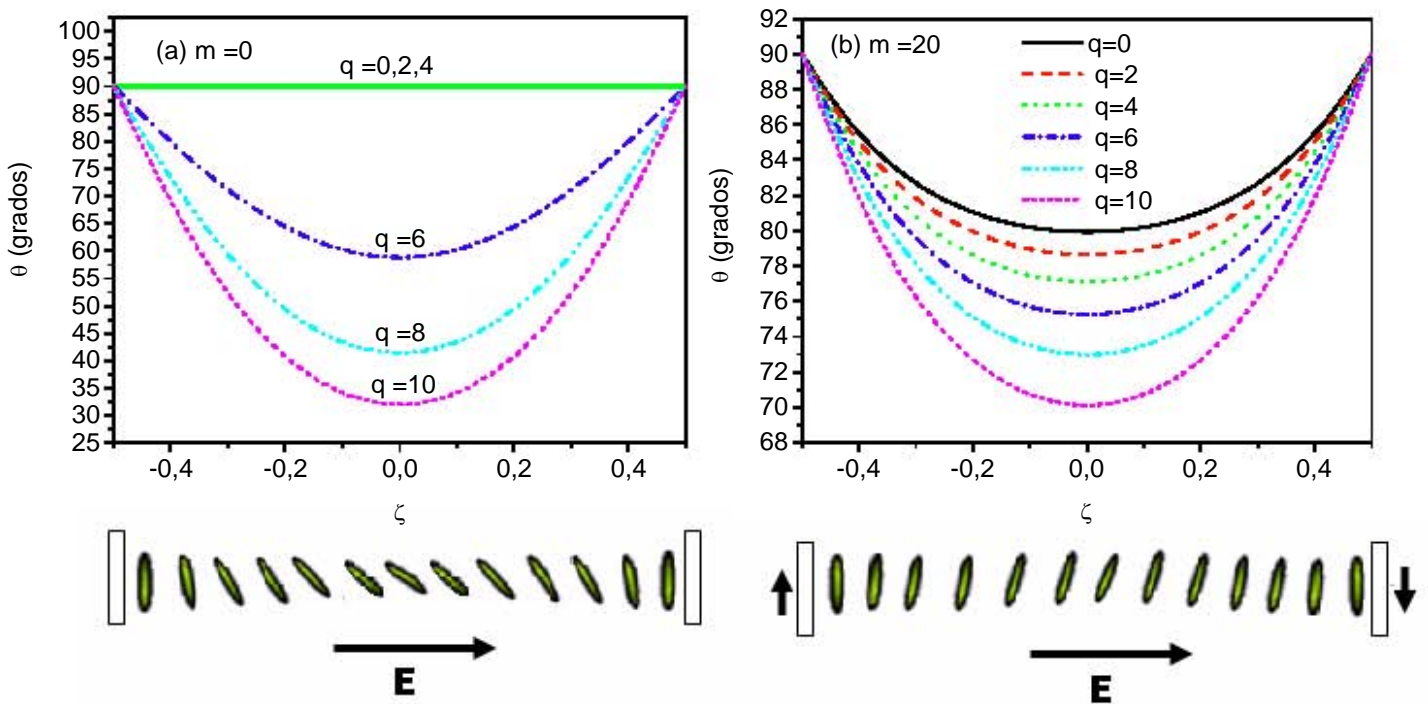


Figura 4.6. Orientación del director para diferentes valores de q con m fija.

Por otra parte cuando consideramos flujos negativos ($m < 0$), el comportamiento es bastante diferente, ya que no se presenta un comportamiento mixto como en el caso de flujos de corte positivos. Aquí conforme $|m|$ crece el ángulo θ disminuye, independientemente del valor de q (ver paneles (a) y (b) de la figura 4.7).

En la figura 4.7.(b), podemos observar que para valores grandes del campo eléctrico la celda se divide en tres regiones, la primera se localiza cerca de la parte inferior de la celda, en donde las moléculas se encuentran paralelas a la placa ($\theta = 90^\circ$) y terminando cuando las moléculas adoptan una orientación perpendicular a la placa ($\theta = 0^\circ$), a esta primera región se le puede considerar como una celda híbrida (por el alineamiento homeotrópico), en esta región las moléculas se inclinan en dirección opuesta a las manecillas del reloj. La segunda zona se inicia cuando las moléculas poseen una orientación perpendicular ($\theta = 0^\circ$) a las placas, aquí las moléculas también se inclinan en dirección opuesta a las manecillas del reloj e incluso hasta en cierto momento llegan a poseer ángulos negativos (en el centro de la celda), esta región termina cuando las moléculas nuevamente adoptan una posición perpendicular a las placas ($\theta = 0^\circ$), finalmente la tercera región se localiza en la parte superior de la celda, empieza cuando las moléculas poseen una

orientación perpendicular a las placas ($\theta = 0^\circ$), y termina en la placa superior de la celda en donde las moléculas tienen una orientación paralela a las placas ($\theta = 90^\circ$), en esta última región las moléculas se inclinan en dirección de las manecillas del reloj, esta tercera región al igual que la primera puede considerarse como una celda híbrida. La presencia de estas tres regiones son consecuencia de la acción simultánea de dos efectos: el campo eléctrico y los flujos de corte negativos aplicados, ya que ambos tienden a disminuir el ángulo θ de las moléculas conforme van aumentando su valor, es decir, tienden a alinearlas verticalmente, tanto que en la segunda región llegan a poseer ángulos negativos. Posteriormente en la tercera región las condiciones de anclaje fuertes juegan un papel muy importante ya que obligan a las moléculas a irse alineando horizontalmente conforme se acercan a la placa superior para satisfacer las condiciones de frontera.

En la figura 4.7. (c) cabe resaltar que para un flujo $m = -20$, el campo eléctrico no juega un papel importante en la orientación de las moléculas, es decir, la orientación del director es poco sensible a la aplicación del campo eléctrico.

Otro aspecto que es importante mencionar es que en la figura 4.7. (a), notamos la ausencia de la curva que corresponde a $m = -5$, esto se debe a que este caso se localiza dentro de la región de configuración única en nuestro diagrama de fases (figura 4.4) y por lo tanto ya fue considerado cuando se trataron flujos positivos.

4.2. PERFIL DE VELOCIDADES

Integrando la ecuación (3.34), tomando en consideración las condiciones de frontera de no-deslizamiento dadas por la ecuación (3.37), obtenemos la siguiente expresión para la velocidad del nemático:

$$\tilde{v}_x(\zeta) = -\text{sign}(v_0) \left\{ 1 - 2 \frac{\int_{-1/2}^{\zeta} \frac{d\zeta'}{\eta[\theta(\zeta')]} \right\} \quad (4.42)$$

Una vez que $\theta(\zeta)$ ha sido determinada numéricamente de la ecuación (3.39), puede ser sustituida dentro de la ec. (4.42) para obtener $\tilde{v}_x(\zeta)$.

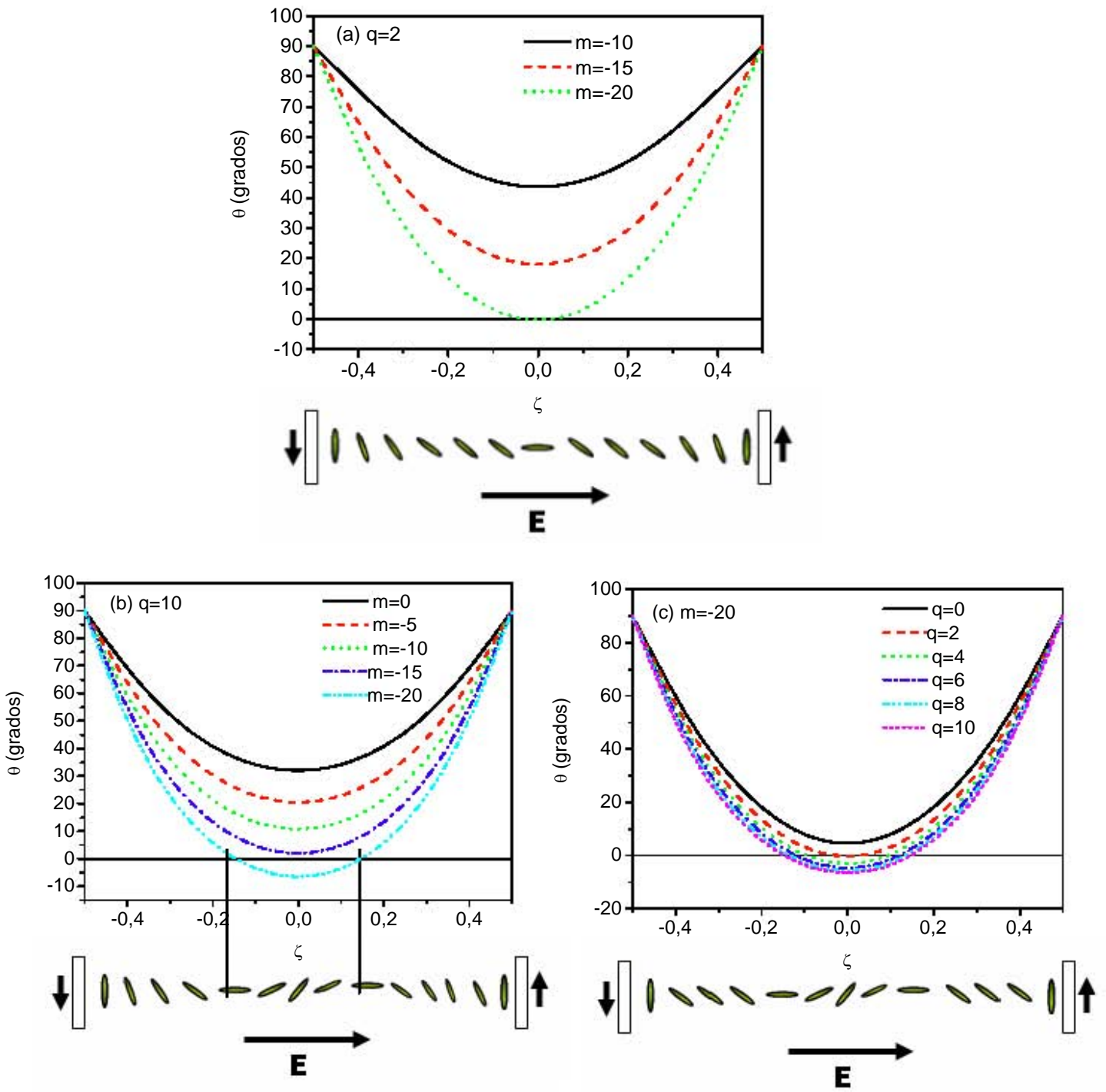


Figura 4.7. Orientación del director para valores de m negativos.

El perfil de velocidad para flujos corte de positivos ($m > 0$) se muestra en la figura 4.8. La velocidad es parametrizada para los casos de (a) $q=2$, (b) $q=10$ y (c) $m=20$. Al observar esta figura podemos ver claramente que el perfil $\tilde{v}_x(\zeta)$ en el panel (a) y en el panel (c) es poco sensible al flujo de corte y al campo eléctrico aplicado, es decir, es casi independiente de ambos. Sólo en el panel (b) $q=10$, se aprecia una variación del perfil de velocidad con el flujo. Esto está de acuerdo con el hecho de que a campos eléctricos altos las moléculas de cristal líquido se alinean más efectivamente.

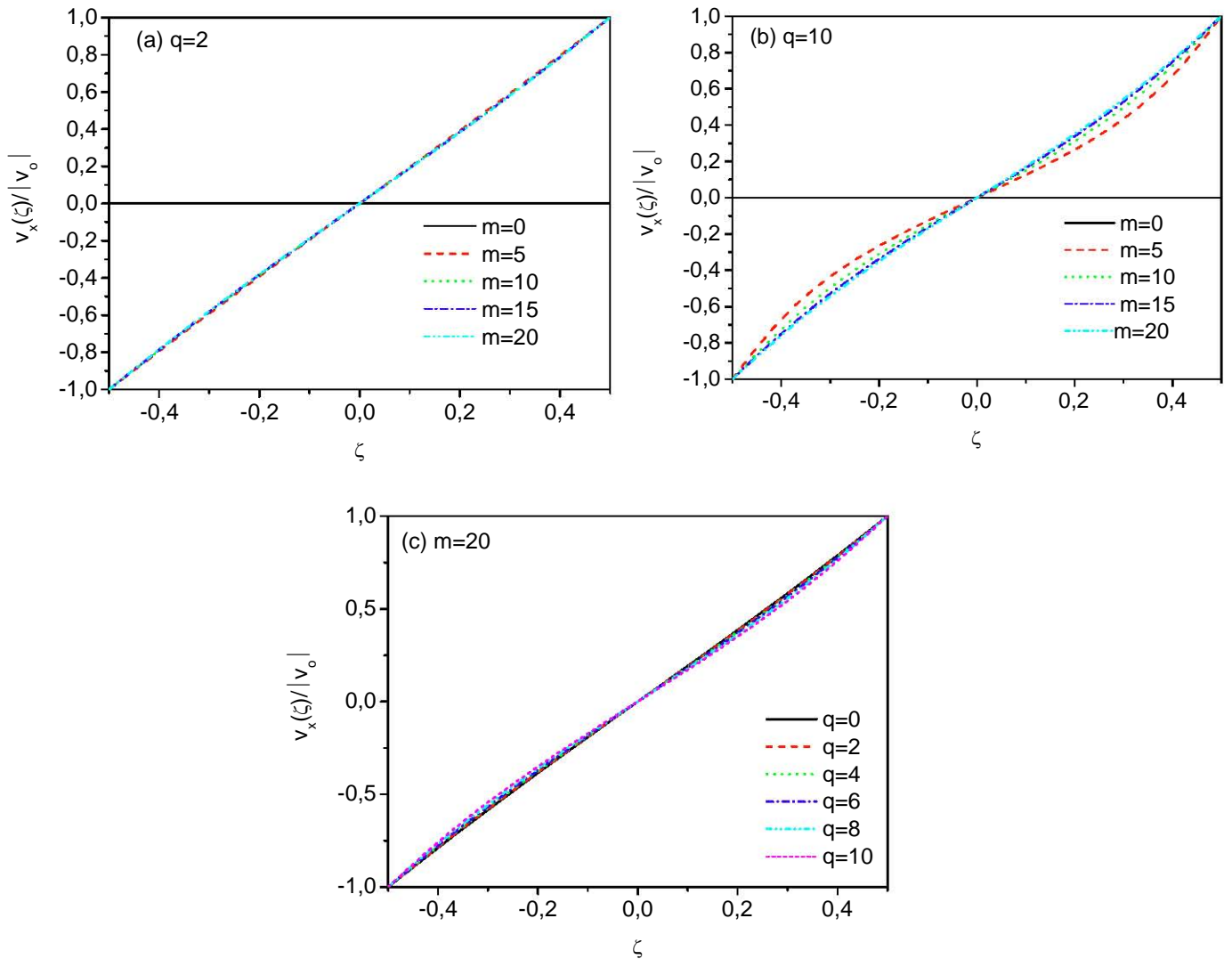


Figura 4.8. Perfil de velocidad para valores de m positivos.

Por lo que respecta a flujos de corte negativos ($m < 0$), obtuvimos que para campos eléctricos pequeños ($q=2$, $E = 4717$ Newton/Coulomb) el flujo es el que se encarga de orientar las moléculas como puede verse en la figura 4.9. (a). Para campos eléctricos grandes ($q=10$, $E = 10547$ Newton/Coulomb) ocurre lo contrario ya que el flujo no influye lo suficiente para alinear las moléculas y apreciar un cambio en la curva de velocidad (ver figura 4.9.(b)). En el caso de flujos negativos grandes ($m=-20$), tenemos que la velocidad de las moléculas es independiente de q ya que no influye lo suficiente en ellas como para apreciar el cambio de velocidad (ver figura 4.9.(c)). Es importante mencionar que a pesar de que en algunos casos no se aprecia el cambio de velocidad, las pendientes de estas líneas no son las mismas que las que corresponden a un fluido Newtoniano, en los cuales el perfil de velocidad es un línea recta.

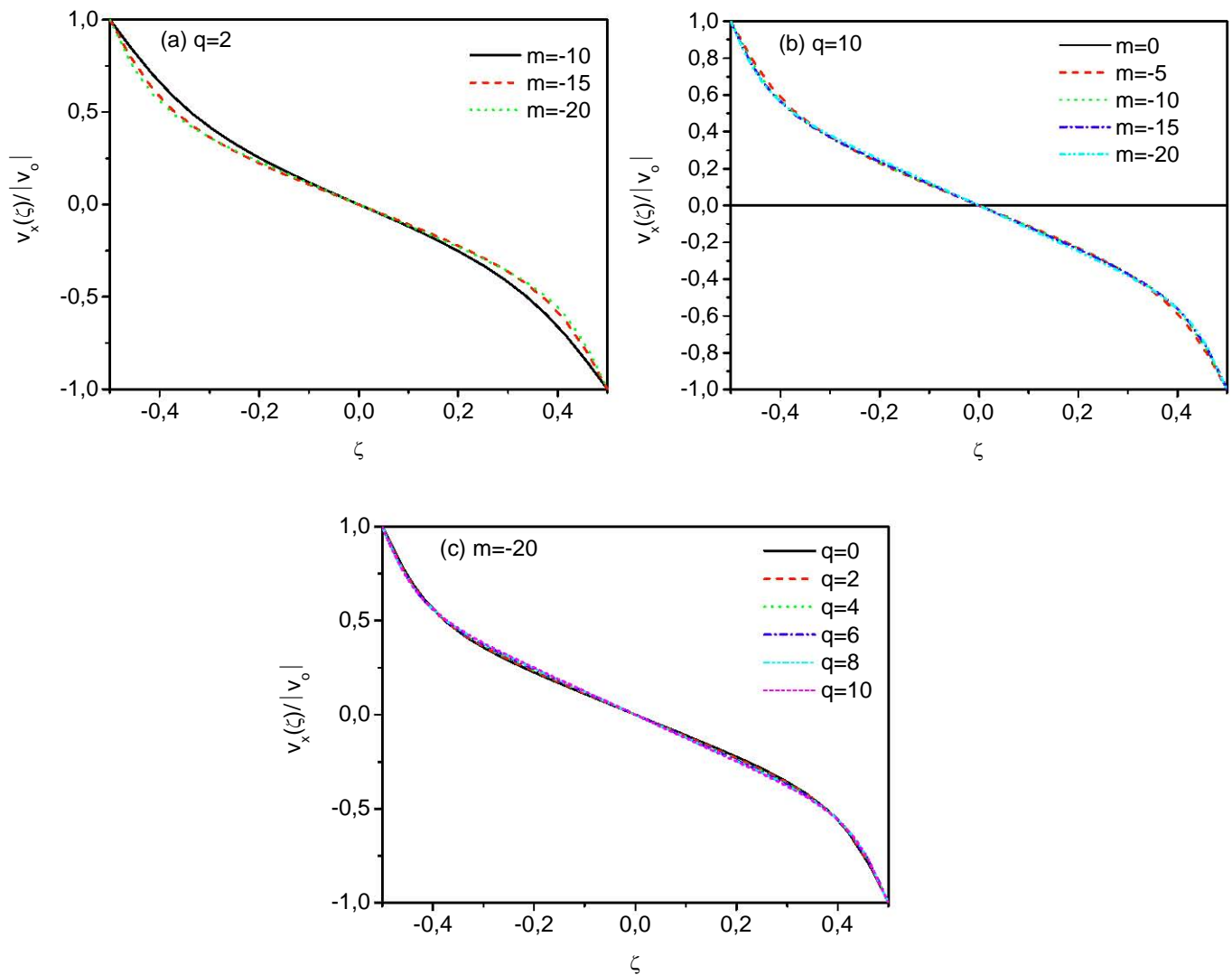


Figura 4.9. Perfil de velocidad para valores de m negativos.

4.3. VISCOSIDAD

La viscosidad puede ser calculada de la ec. (3.27). La viscosidad depende de la posición en la celda y es máxima cuando las moléculas están alineadas perpendicularmente a la dirección del flujo y mínima cuando las moléculas están alineadas en la dirección del flujo. De hecho, el valor de la viscosidad en los puntos donde las moléculas están alineadas perpendicularmente a la dirección del flujo coincide con el valor de la viscosidad de Miesowicz η_c , mientras la viscosidad donde las moléculas están paralelas a la dirección del flujo toma el valor η_b . En puntos intermedios la viscosidad toma valores intermedios. Para el cristal líquido considerado en este trabajo (5CB) los valores de dos de las tres viscosidades de Miesowicz son $\eta_b = 0.0204$ Pa-s y $\eta_c = 0.1052$ Pa-s.

En la figura 4.10. mostramos el comportamiento de la viscosidad para flujos positivos ($m > 0$), y observamos que manteniendo campos pequeños (ver panel (a) $q=2$), conforme incrementamos el valor del flujo la viscosidad aumenta, alcanzando su máximo valor justo en el centro de la celda, mientras que para campos fijos grandes ($q=10$), ocurre lo contrario, es decir, la viscosidad disminuye conforme aumenta el valor de m , alcanzando su mínimo valor justo en el centro de la celda. Esto es consecuencia del comportamiento mixto que presenta la orientación del director. Por otro lado cuando mantenemos flujos positivos fijos (ver paneles (c) y (d)), la viscosidad aumenta conforme se incrementa la magnitud del campo eléctrico, esto está de acuerdo con el hecho de que el campo eléctrico provoca que las moléculas se orienten verticalmente y por ende aumente la viscosidad del nemático.

Otro aspecto importante que cabe resaltar es que cuando no existe flujo (ver paneles (a) y (c)) el cristal líquido no sufre ningún cambio en su viscosidad a pesar de estar presente un campo eléctrico, esto es porque el campo eléctrico aplicado está por debajo del crítico ($q_c=4.96$) y no es lo suficientemente intenso como para influir en la orientación de las moléculas y como consecuencia de esto cambiar su viscosidad. En contraste a lo anterior podemos decir que en la presencia de flujos y campos eléctricos grandes (ver paneles (b) y (d)), el comportamiento es distinto ya que aquí el cristal líquido posee una cierta viscosidad mayor a η_b desde un inicio, esto es porque existen factores externos lo suficientemente intensos como para influir en su orientación y por ende en su viscosidad.

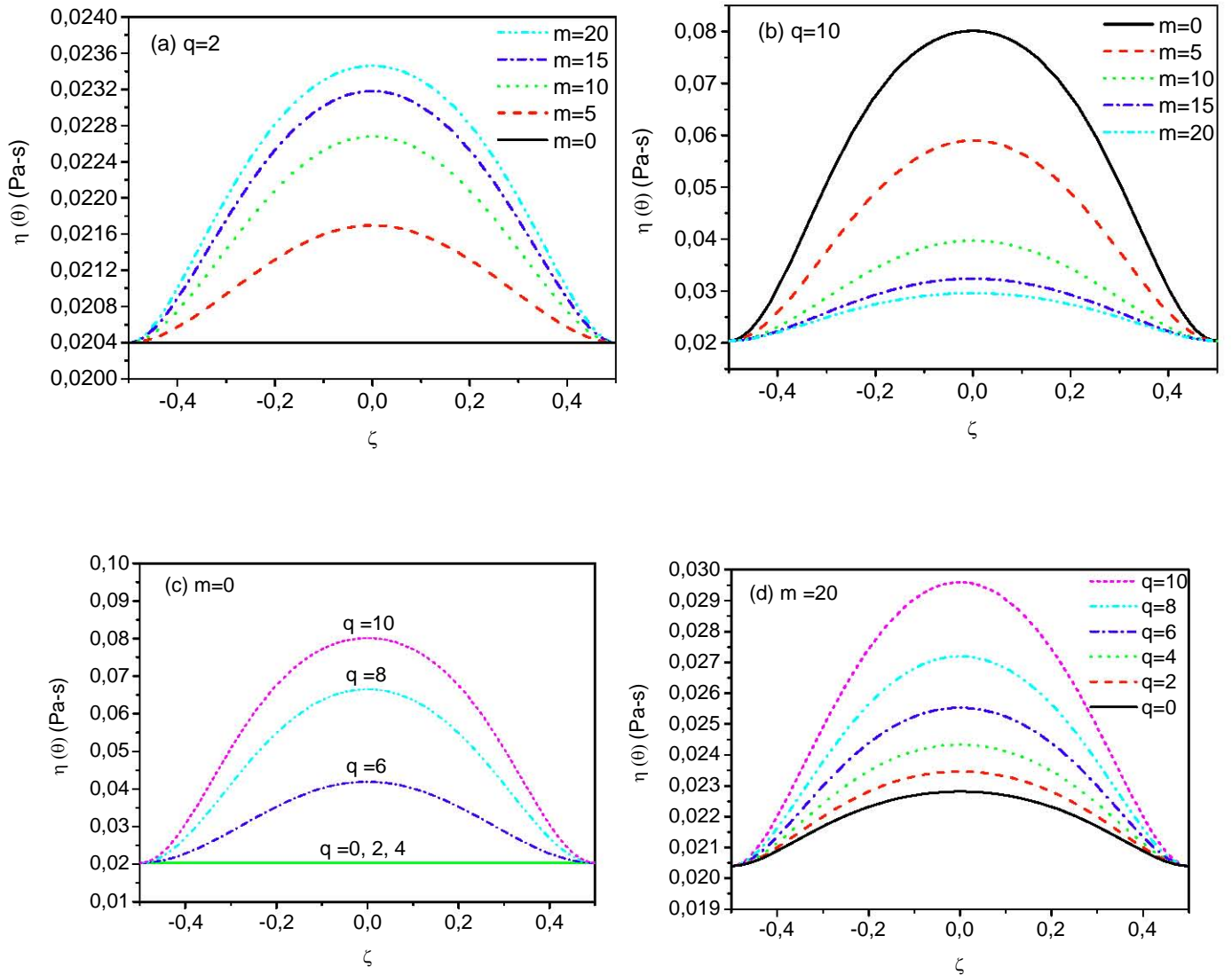


Figura 4.10. Viscosidad local para valores de m positivos.

Por lo que se refiere al comportamiento de la viscosidad para flujos negativos ($m < 0$), tenemos que tanto para campos pequeños como para campos grandes fijos, conforme aumentamos el valor de $|m|$ la viscosidad se incrementa llegando a un máximo el cual corresponde a la viscosidad de Miesowicz η_c (ver figuras 4.11. (a) y (b)). Incluso en la figura 4.11. (b) en la que aplicamos un campo eléctrico grande ($q=10$) notamos la presencia de un mínimo, esto es causado por el comportamiento del director que en una región de la celda se orienta con ángulos negativos.

Por otro lado en la figura 4.11. (c) en la que mantenemos una m constante y variamos campo eléctrico notamos que la viscosidad aumenta; esto es consistente con el hecho de que a mayor campo eléctrico las moléculas se orientan cada vez más verticales y por consecuencia la viscosidad aumenta. Es importante resaltar que en el panel (c) de la figura 4.11, en el cual consideramos un flujo igual a $m=-20$, la viscosidad es poco sensible a la aplicación del campo eléctrico.

Algo que es importante aclarar, es que en el panel (a) de la figura 4.11, observamos que no se encuentra la curva de $m=-5$, esto es porque este caso ya fue considerado cuando se trataron los flujos positivos, es decir, se localiza dentro en la región de configuración única en nuestro diagrama de fase (figura 4.4).

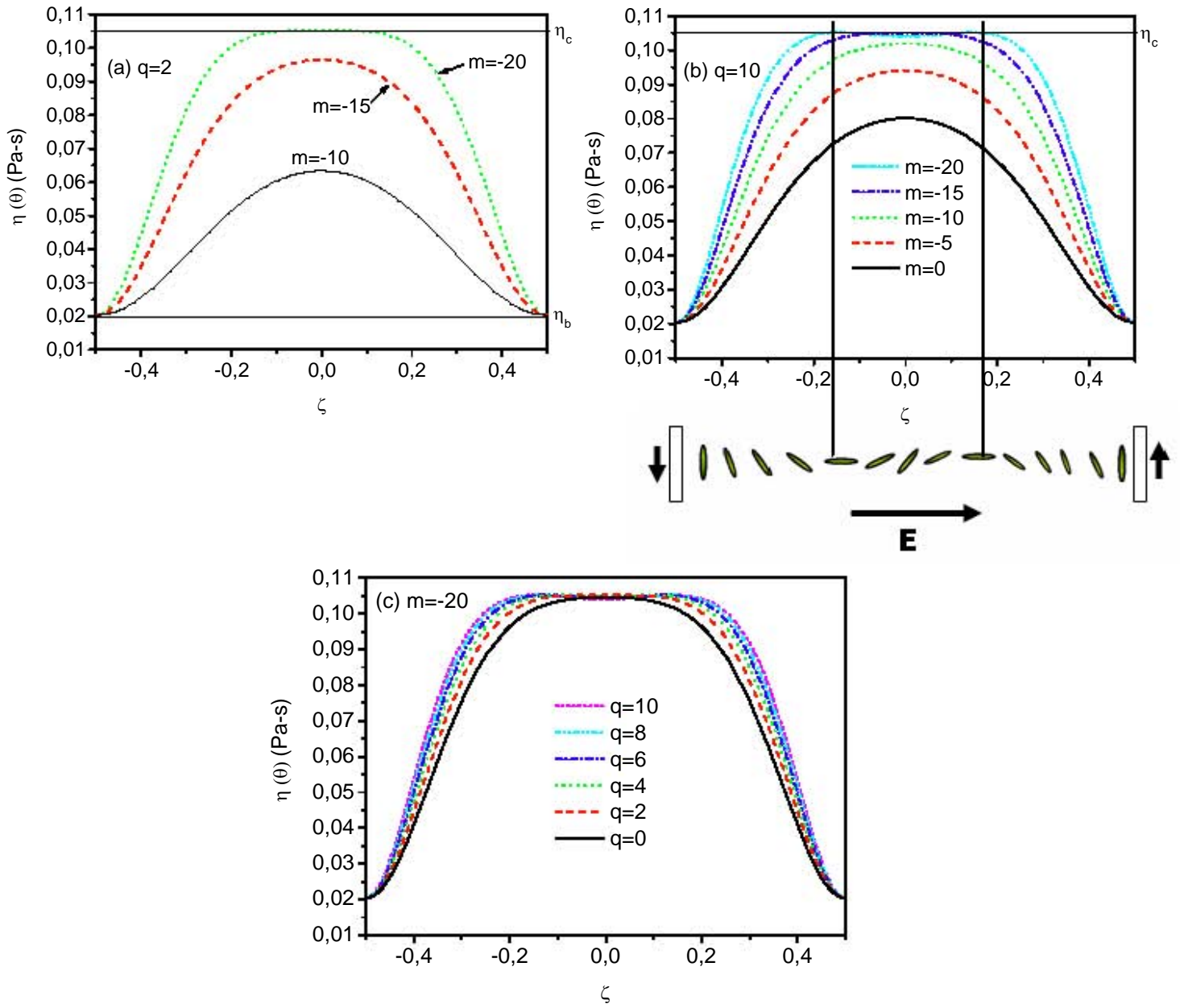


Figura 4.11. Viscosidad local para valores de m negativos.

Desde un punto de vista experimental, lo que se mide es una viscosidad promedio definida como:

$$\langle \eta (q, m) \rangle \equiv \int_{-1/2}^{1/2} \eta[\theta(\zeta); q, m] d\zeta \quad . \quad (4.43)$$

En la figura 4.12. graficamos la viscosidad promedio como función de (a) q y (b) m . El aumento en la viscosidad promedio, conforme incrementamos el valor del campo eléctrico es evidente en el panel (a). Este efecto electrorreológico es poco evidente, en la región delimitada por un valor mínimo que la viscosidad promedio puede tomar $\eta (\theta_{max})$, cuando las moléculas están orientadas con un ángulo θ_{max} , esto ocurre cuando se manejan flujos positivos grandes y campo eléctricos pequeños (campos por debajo del campo crítico $q_c=4.96$). Por otro lado el efecto electrorreológico es mayor en el caso de flujos pequeños y campos eléctricos grandes, teniendo la viscosidad promedio un valor máximo correspondiente a la viscosidad de Miesowicz η_c . Esto es debido a que en esta situación la influencia del campo eléctrico domina sobre la del flujo. El mínimo y el máximo de la viscosidad promedio son $\eta (\theta_{max}) \approx 0.02375$ Pa-s y $\eta_c = 0.1052$ Pa-s, respectivamente.

Ahora refiriéndonos a la figura 4.12. (b), la viscosidad promedio como función de m , observamos un interesante comportamiento no-Newtoniano con regiones alternadas de "shear-thickening" y "shear-thinning". En esta figura podemos observar como en la región de flujos de corte positivos ($m > 0$), y campos pequeños ($q < 5$) existe una región de "shear- thickening" (la viscosidad aumenta conforme aumentamos el flujo de corte en el cristal líquido), y para campos grandes ($q > 5$) una región de "shear-thinning" (la viscosidad disminuye conforme aumentamos el flujo de corte en el cristal líquido). Ahora analizando la misma figura pero para flujos de corte negativos ($m < 0$), notamos que para valores de $|m| \geq -25$, existe una región de "shear-thinning", mientras que para valores de $|m| \leq -25$ existe una región de "shear-thickening".

Cabe mencionar que tanto en el panel (a), como en el panel (b), notamos que para los flujos negativos las curvas se interrumpen abruptamente, esto se debe a que estas curvas se encuentran en la región de soluciones múltiples en nuestro diagrama de fase del que hablamos al principio de este capítulo.

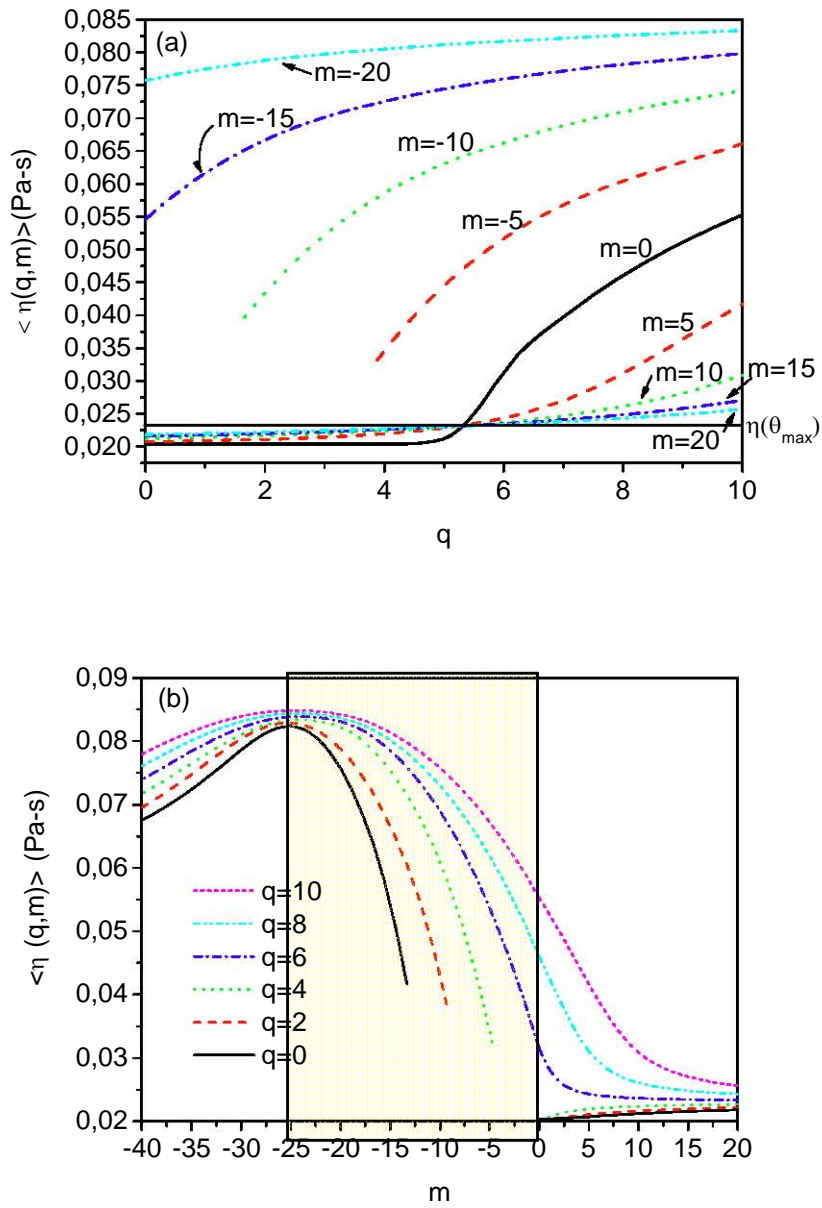


Figura 4.12. Viscosidad promedio como función de (a) q y (b) m .

4.4. ESFUERZOS DE CORTE

Es de gran utilidad calcular la componente del esfuerzo σ_{xz} de la ecuación (3.4). De la evaluación de dicha componente resulta lo siguiente:

$$\begin{aligned} \sigma_{xz} = & \alpha_1 n_x n_z [V_{xx} n_x n_x + V_{xy} n_x n_y + V_{xz} n_x n_z + V_{yx} n_y n_x + V_{yy} n_y n_y + V_{yz} n_y n_z \\ & + V_{zx} n_z n_x + V_{zy} n_z n_y + V_{zz} n_z n_z] + \alpha_2 n_z N_x + \alpha_3 n_x N_z + \alpha_4 V_{xz} \\ & + \alpha_5 n_z [V_{xx} n_x + V_{xy} n_y + V_{xz} n_z] + \alpha_6 n_x [V_{zx} n_x + V_{zy} n_y + V_{zz} n_z] \end{aligned} \quad (4.44)$$

donde las variables V_{ij} y N_i se obtienen con la ayuda de la ecuaciones (3.5) y (3.6), considerando que el vector velocidad sólo tiene componente en la coordenada "x" y que además solo varía con respecto a la coordenada "z", y despreciando el término que depende del tiempo en la ec. (3.6) (ya que solo nos interesa el régimen estacionario), obtenemos lo siguiente:

$$V_{xx} = V_{xy} = V_{yy} = V_{yx} = V_{yz} = V_{zz} = V_{zy} = 0 \quad (4.45)$$

$$V_{xz} = V_{zx} = \frac{1}{2} \frac{dv_x}{dz} \quad (4.46)$$

$$N_x = -\frac{1}{2} \frac{dv_x}{dz} n_z \quad (4.47)$$

$$N_z = \frac{1}{2} \frac{dv_x}{dz} n_x \quad (4.48)$$

Sustituyendo las ecuaciones (4.45), (4.46), (4.47) y (4.48), así como los componentes del vector director \hat{n} en la ecuación (4.44), la expresión se reduce a:

$$\sigma_{xz} = \frac{1}{2} \frac{dv_x}{dz} [2\alpha_1 \text{sen}^2 \theta \cos^2 \theta - \alpha_2 \cos^2 \theta + \alpha_3 \text{sen}^2 \theta + \alpha_4 + \alpha_5 \cos^2 \theta + \alpha_6 \text{sen}^2 \theta] \quad (4.49)$$

La componente anterior se evaluó en ambas placas de la celda, las cuales proveen las fuerzas de arrastre, D_{inf} y D_{sup} , por unidad de área, ejercidas por el flujo del nemático sobre la placa inferior y la placa superior, respectivamente. Las expresiones explícitas de estas fuerzas pueden escribirse como:

$$\begin{aligned}
 D_{\text{inf}} &= -\sigma_{xz} \Big|_{\zeta=-1/2} \\
 &= \eta_b \frac{|\nu_0|}{l} \frac{d\tilde{\nu}_x}{d\zeta} \Big|_{\zeta=-1/2} \\
 &= \eta_b \frac{mK_1}{l^2\eta(\theta)}
 \end{aligned} \tag{4.50}$$

$$\begin{aligned}
 D_{\text{sup}} &= \sigma_{xz} \Big|_{\zeta=1/2} \\
 &= \eta_b \frac{|\nu_0|}{l} \frac{d\tilde{\nu}_x}{d\zeta} \Big|_{\zeta=1/2} \\
 &= \eta_b \frac{mK_1}{l^2\eta(\theta)}.
 \end{aligned} \tag{4.51}$$

Como lo muestran las ecuaciones anteriores la evaluación para D_{inf} y D_{sup} resultó ser igual, esto se debe a que la configuración de la celda de estudio es planar – planar, es decir, las moléculas tienen alineamiento homogéneo en ambas placas y por ende

CAPÍTULO 5. CONCLUSIONES

Motivados por las propiedades intrínsecas de los fluidos exóticos, en esta tesis dedujimos un modelo hidrodinámico para las moléculas de un cristal líquido nemático (5CB) confinado en una celda planar – planar, las cuales están sujetas a la acción simultánea de un flujo de corte y un campo eléctrico perpendicular a las paredes de la celda.

El fundamento teórico del modelo hidrodinámico en cuestión tiene sus cimientos en la teoría nematodinámica de Ericksen – Leslie – Parodi, y con la finalidad de no complicar demasiado el modelo se hicieron los siguientes supuestos:

- ✓ Estudiar en su estado estacionario al cristal líquido (es decir, una vez que la reorientación de las moléculas ha ocurrido).
- ✓ El cristal líquido se encuentra en equilibrio térmico a la temperatura ambiente, es decir, estamos hablando de una descripción isotérmica del sistema.
- ✓ Los únicos factores externos que influyen en el sistema de estudio son el campo eléctrico y el flujo de corte aplicados.

Empleamos el método numérico de prueba y error o “*shooting*” para resolver las ecuaciones diferenciales obtenidas, que corresponden a la configuración del director y al perfil de velocidad. Además cabe destacar la obtención del diagrama de fases para nuestro sistema de estudio. Gracias a éste podemos observar para qué combinaciones de los factores externos considerados existe una configuración única del nemático y en cuales existen varias configuraciones posibles del mismo. Así mismo, encontramos que el efecto del campo eléctrico sobre las moléculas del cristal líquido es alinearlas verticalmente. Por otra parte, el efecto del flujo cortante consiste en alinear las moléculas paralelamente a las placas para $m > 0$ y perpendicularmente a las placas para $m < 0$, provocando con esto una modificación apreciable en las propiedades reológicas del nemático. Respecto al perfil de velocidad podemos decir que para los intervalos empleados de campos eléctricos y flujos, el cambio en la velocidad no es significativo, sin embargo permite

observar que el nemático tiene un perfil de velocidad que corresponde a un fluido no-newtoniano. Esto último es más evidente cuando manejamos flujos negativos. Es importante hacer notar que bajo la acción del campo eléctrico el comportamiento no-newtoniano es menos notorio.

Corroboramos que, tal y como la teoría lo indica, la reorientación de las moléculas nemáticas debida el campo eléctrico provoca un cambio en la viscosidad del cristal líquido, dando lugar a lo que se conoce como efecto electro-reológico. Los resultados que obtuvimos en cuanto a la viscosidad promedio son consistentes con las viscosidades de Miesowicz, esto quiere decir que las viscosidades obtenidas no fueron menores que η_b ni mayores que η_c , lo anterior comprueba que cuando las moléculas están paralelas a la dirección del flujo muestran menos resistencia a fluir (su viscosidad es pequeña), mientras que cuando se encuentran perpendiculares a la dirección del flujo la resistencia a fluir es mayor (su viscosidad es grande), ya que las moléculas grandes y alargadas necesitan menos energía para deslizarse unas respecto a las otras a lo largo de sus ejes, que para moverse lateralmente. Es importante mencionar que las viscosidades más grandes se encuentran en el centro de la celda (para casi todas las combinaciones de los flujos y campos considerados, exceptuando la figura 4.11 (b) en la cual se presenta un mínimo en esta región), mientras que cerca de las placas la viscosidad es muy pequeña, debido a la interacción del cristal líquido con el sólido.

Algo que es importante resaltar es que al variar el flujo cortante el cristal líquido se comporta como un fluido dilatante o pseudoplástico, exhibiendo los fenómenos de "*shear thickening*" y "*shear thinning*", respectivamente.

Finalmente calculamos las fuerzas de arrastre sobre las placas de la celda, tanto en la superior como en la inferior y encontramos que dependen de m pero son independientes de q .

Para complementar este trabajo sería productivo estudiar al sistema considerando un anclaje débil entre las moléculas y las paredes de la celda. También sería deseable utilizar valores de flujo y campo eléctrico más amplios a los manipulados en esta tesis. Esto daría origen a más soluciones de la ecuación diferencial para el problema (ver diagrama de

fases), las cuales sería conveniente analizar para ver de que manera influyen en el comportamiento del cristal líquido.

Para trabajos posteriores sería bastante provechoso estudiar a los cristales líquidos confinados dentro de celdas con diferentes geometrías a la rectangular, por ejemplo en cilindros concéntricos, sometiéndolos a flujos oscilantes o de "Couette", igualmente se podría estudiar a las mezclas de cristales líquidos nemáticos en donde las anisotropías dieléctricas de algunas moléculas sean positivas y las de otras negativas, lo cual implicaría que algunas moléculas se orientaran paralelamente y otras perpendicularmente al campo eléctrico aplicado. Así mismo podríamos proponer diferentes restricciones a las hechas para esta tesis, como estudiar el sistema en un régimen no estacionario. Otra alternativa interesante sería estudiar el efecto de otros factores como las variaciones en la temperatura.

BIBLIOGRAFÍA

- [1] Daoud Mohamed and Williams Claudine E., "Soft Matter Physics", Springer, Germany 1999, pp. 290-300.
- [2] Collings Peter J. and Hird Michael, "Introduction to liquid crystals: Chemistry and Physics", Taylor & Francis Ltd, London 1997, pp. 1-16.
- [3] Rodríguez Zepeda Rosalío "Líquidos Exóticos", Colección Ciencia Para Todos, FCE 2^a ed, México, 2001, pp. 53-71.
- [4] Koo. I. C. "Liquid Crystals Physical Properties and Nonlinear Optical Phenomena", Jhon Wiley, New York, 1995. pp 1-11.
- [5] Bahadur Birendra, "Liquid Crystal, Application and Uses", Vol 1. World Scientific, Singapur, 1990, pp.1 – 6, 92 - 129.
- [6] Dunmur, David A. "Liquid Crystals Fundamentals", World Scientific, Singapur, 2002, pp. 1-10.
- [7] Collings, Peter. "Liquid Crystals: "Nature's delicate phase of matter"", Adam Hilger Bristol, USA, 1990. pp. 5-12, 35-55.
- [8] L. M. Blinov, V.G. Chigrinov, "Electrooptic Effects in Liquid Crystal Materials", Springer – Verlag, New York, 1994, pp. 4-5.
- [9] Jones Richard A. L., "Soft Condensed" Oxford University Press, New York, 2002. pp. 104-128.
- [10] Blinov, L. "Cristales Líquidos", Mir Moscu, URSS, 1985. pp.15-20, 54-60.

-
- [11] R. B. Bird, W. E. Stewart, y E. N. Lightfoot, "Fenómenos de Transporte", Reverte Barcelona 1992, pp. 1-4, 1-5, 1-10, 1-11, 1-12.
- [12] White M. Frank. "Mecánica de Fluidos", Mc Graw Hill, España 1990 pp. 238-240.
- [13] Stewart W. Ian, "The static and dynamic continuum theory of Liquid Crystals", Taylor and Francis, USA, 2004.
- [14] Irving H. Shames, "Mecánica de Fluidos" Mac Graw-Hill Interamericana Colombia 1995, pp.37-38.
- [15] Levi E. "Mecánica del Medio Continuo", Limusa-Wiley, México, 1971.
- [16] Aki K. and P. G. Richards, "Quantitative seismology, theory and methods", W. H. Freeman, San Francisco, 1980, pp. 19.
- [17] S. Chandrasekhar, "Liquid Crystals", Cambridge University Press, Great Britain, 1992, pp. 85-93.
- [18] A. M. Donald and A. H. Windle, "Liquid Crystalline Polymers", Cambridge University Press, Great Britain 1992. pp 204-209.
- [19] Kleman M. and Lavrentovich, "Soft Matter Physics", New York, Springer – Verlag, 2003, pp. 210-220.
- [20] W. H. de Jeu, "Physical Properties of Liquid Crystalline Materials", Volumen 1, University of Hull, New York, 1980. pp 97-102.
- [21] Ronald G. Larson, "The structure and Rheology of complex fluids" Oxford University Press 1999, pp. 443 -455.

-
- [22] M. De Volder, K. Yoshida, S. Yolota y D. Reynaerts, "The use of liquid crystals as electrorheological fluids in Microsystems: model and measurements", J. Micromech. Microeng 16, 6512-619 (2006).
- [23] J. Adrian Reyes, O. Manero, y R.F. Rodriguez, "Electrorheology of nematic liquid crystals in uniform shear flow" Rheol Acta 40, 426 (2001).
- [24] R. F. Rodriguez, J. A. Reyes, y O. Manero, "Model for the electrorheological effect in flowing polymeric nematics" J. Chem. Phys. 110, 8197 (1999).
- [25] D. Marenduzzo, E. Orlandini, y J. M. Yeomans, "Interplay between shear flow and elastic deformations in liquid crystals", J. Chem. Phys., 121, 582 (2004).
- [26] Colin Denniston, Enzo Orlandini, J.M. Yeomans "Simulations of liquid crystals in Poiseuille flow", arXiv 12317 (2000).
- [27] R. Kent, Nagle, Safe B. Edward et al. "Fundamentals of Differential Equations and Boundary Value Problems", 3^o ed. USA, Addison Wesley 2000.