



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO

FACULTAD DE ESTUDIOS SUPERIORES ZARAGOZA

**“RESPUESTA DE UNA CELDA HÍBRIDA DE
CRISTAL LÍQUIDO NEMÁTICO SOMETIDA A LA
ACCIÓN SIMULTÁNEA DE UN CAMPO
ELÉCTRICO Y UN FLUJO DE POISEUILLE”**

T E S I S

QUE PARA OBTENER EL TÍTULO DE:

INGENIERO QUÍMICO

P R E S E N T A:

ALAN LEOPOLDO ESTRADA LÓPEZ

DIRECTOR: DR. CARLOS IGNACIO MENDOZA RUIZ



2007



Universidad Nacional
Autónoma de México

Dirección General de Bibliotecas de la UNAM

Biblioteca Central



UNAM – Dirección General de Bibliotecas
Tesis Digitales
Restricciones de uso

DERECHOS RESERVADOS ©
PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL

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

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



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

OFICIO: FESZ/JCIQ/037/07

ASUNTO: Asignación de Jurado

ALUMNO: ESTRADA LÓPEZ ALAN LEOPOLDO
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	Dr. Roberto Mendoza Serna
VOCAL	Dr. Carlos Ignacio Mendoza Ruiz
SECRETARIO	I. I. Q. Alejandro Rubio Martínez
SUPLENTE	M. en. C. Javier Hernández Aguilar
SUPLENTE	Dr. Jorge Alejandro Reyes Esqueda

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 10 de Septiembre de 2007

JEFE DE LA CARRERA DE ESTUDIOS SUPERIORES


I. Q. RAÚL RAMÓN MORA HERNÁNDEZ
INGENIERÍA QUÍMICA
SECRETARÍA TÉCNICA





AGRADECIMIENTOS

GRACIAS A DIOS

Por darme vida, salud y las posibilidades
para cumplir mis objetivos.

Por darme la familia que tengo.

Por permitirme conocer a los excelentes
amigos con los que cuento.

Por concederme la alegría de terminar mi carrera.



GRACIAS A MI FAMILIA

¡ Gracias Papá !

Por mostrarme con su ejemplo, lo que es ser un hombre en toda la extensión de la palabra.

Por su amor, apoyo y motivación para a llegar a donde hoy estoy.

Por enseñarme a nunca rendirse y trabajar por lo que deseas.

¡ Gracias Mamá !

Por sus plegarias y bendiciones, que me impulsaron alcanzar mis metas.

Por su infinidad de esfuerzos para convertirme en un hombre de bien.

Por su amor, que ha sido mi sustento cada día.

¡ Gracias a mis hermanos !

A Verónica por su tenacidad, a Luis por su dedicación, a Carlos por su fuerza y a Andrés por su orgullo; gracias porque ustedes han sido el mejor ejemplo a seguir.



GRACIAS A LA UNAM

Gracias por darme la oportunidad de pertenecer a la máxima casa de estudios en Latinoamérica.

Gracias por haberme otorgado una beca de tesis de licenciatura a través del proyecto DGAPA PAPIIT número IN107607.

Gracias a la FES “Zaragoza”

Por darme los conocimientos necesarios para ser un Ingeniero Químico de calidad.

Gracias al Instituto de Investigaciones en Materiales

Por concederme su apoyo para realizar mi tesis de licenciatura.

Gracias al Dr. Carlos Ignacio Mendoza Ruiz

Por su confianza, paciencia, consejos y enseñanzas para poder realizar este trabajo de tesis.



Índice

Agradecimientos	3
Índice	6
Resumen	8
Objetivos	9
Introducción	10
Glosario de términos	12
Capítulo 1	
Antecedentes	14
Historia de los cristales líquidos	14
Aplicación de los cristales líquidos	15
Clasificación de los cristales líquidos	18
Orden orientacional y elasticidad de los cristales líquidos	22
La química en los cristales líquidos	24
Respuesta de los cristales líquidos a un campo eléctrico.	30
El cristal líquido nemático 5CB	33
Capítulo 2	
Hidrodinámica de cristales líquidos	34
Nematodinámica de Ericksen, Leslie y Parodi	34
Reología de los cristales líquidos	41
Capítulo 3	
Modelo para describir el comportamiento del cristal líquido nemático	45
Modelo	45
Metodo de solución	49



Capítulo 4	
Resultados	54
Director	55
Perfil de velocidad	59
Velocidad promedio del fluido	62
Viscosidad local	64
Viscosidad aparente	66
Fuerzas de arrastre	67
Capítulo 5	
Conclusiones	70
Conclusiones generales	70
Bibliografía	72
Libros	72
Artículos	72



Resumen

En este trabajo se desarrollo un modelo hidrodinámico para describir el comportamiento de un cristal líquido nemático confinado en una celda, en la cual, la alineación de las moléculas es homeotrópica en una de las placas y homogénea en la otra, es decir, tiene una configuración híbrida. Esta celda se encuentra bajo la influencia simultánea de un campo eléctrico perpendicular y una diferencia de presión. El modelo se basa en la nematodinámica de Ericksen, Leslie y Parodi, de la cual se obtiene una ecuación diferencial para la orientación del director. Esta última se encuentra acoplada a la ecuación de conservación de momento. Posteriormente utilizamos el metodo de disparo (Shooting), el cual, usa el software llamado "Mathematica", este último emplea un método iterativo, donde se buscan las condiciones iniciales, que cumplan con las condiciones a la frontera dentro de un rango especificado. Esto se realizó en un intervalo de campo eléctrico de $q = 0$ a $q = 20$ y un intervalo de flujo de $m = -20$ a $m = 20$; de lo anterior, una vez que el programa encontró las raíces que cumplen con las condiciones a la frontera, podremos saber las condiciones en las que se encuentran las moléculas de cristal líquido en el centro de la celda. Esto último, con el fin de encontrar la configuración del director y el perfil de velocidad de las moléculas de cristal líquido para comprender el comportamiento hidrodinámico de la celda de cristal líquido nemático bajo la acción simultanea de un campo eléctrico y un flujo de Poiseuille.



Objetivos

Objetivo principal

- El objetivo principal de este trabajo será el de estudiar teóricamente, el comportamiento de un cristal líquido nemático con una alineación híbrida, bajo la acción simultánea de un flujo de Poiseuille y un campo eléctrico aplicado perpendicularmente al flujo.

Objetivos particulares

- Estudiar las propiedades reológicas del cristal líquido nemático (5CB)
- Establecer un modelo basado en la nematodinámica de Ericksen, Leslie y Parodi, de la cual se obtenga una ecuación para la orientación del director.
- Utilizar el método de disparo (shooting) para resolver las ecuaciones que describen el comportamiento del cristal líquido.



Introducción

Resulta extraño concebir la idea de un cristal líquido, ya que por un lado, llamamos líquido a una sustancia que fluye y toma la forma del recipiente que lo contiene, que cuenta con un orden molecular aleatorio, el cual les permite comportarse de esta manera tan libre. Por otro lado tenemos a los cristales, que son sólidos, que tienden a retener su forma, pues cuentan con un orden molecular tanto posicional como orientacional. Sin embargo existen otras sustancias que tienen más orden que un líquido pero menos que un cristal. Es decir, estas sustancias poseen propiedades de los líquidos, fluidez y viscosidad, y al mismo tiempo propiedades ópticas que se parecen a las de los cristales, estas sustancias son llamadas cristales líquidos.

Los cristales líquidos son materiales muy interesantes, ya que cuentan con simetría y propiedades elásticas muy particulares, lo cual origina que tengan muchas aplicaciones tecnológicas. En los últimos años se han hecho grandes avances en la utilización de los cristales líquidos como sustancias electro-reológicas, es decir, que sus propiedades reológicas cambian en presencia de un campo eléctrico, debido a esto último, los cristales líquidos han despertado un gran interés para su posible aplicación en microsistemas. Al tener la capacidad de controlar la viscosidad del cristal líquido aplicándole un campo eléctrico, permite considerar una gran cantidad de aplicaciones, en muchas ramas de la ciencia.

Algunos de los ejemplos más recientes en los que han tenido aplicación los cristales líquidos son: apagadores activos, altavoces, discos duros, pantallas, termómetros, etc. Además de que los cristales líquidos cuentan con la gran ventaja de ser sustancias electro-reológicas, que tienen la peculiaridad de no contener partículas suspendidas, esta homogeneidad es de particular importancia para su utilización en microsistemas en canales pequeños, ya que otras sustancias podrían obstruir el canal o generar problemas de aglomeración, sedimentación o abrasión.

En trabajos anteriores sobre cristales líquidos, se ha estudiado el comportamiento de estos últimos al encontrarse confinados en celdas o capilares, bajo la influencia de un flujo de Poiseuille, de un esfuerzo de corte, de un flujo Couette o bajo la influencia de un campo eléctrico o un campo magnético. Sin embargo, pocos han tomado en consideración la influencia simultánea de dos de estos últimos. También es pertinente mencionar que muy pocos de estos trabajos han tomado en consideración la alineación híbrida de las moléculas en las fronteras de la celda. La alineación híbrida tiene la particularidad de que las moléculas que se encuentran en una de las fronteras tienen una alineación homeotrópica, es decir, que se posicionan perpendicular a la superficie de la celda, mientras que en la otra frontera las moléculas adoptan una alineación homogénea, es decir, que las moléculas se posicionan paralelamente a la superficie de la celda [7].



Por lo anterior, en este trabajo analizaremos el comportamiento de un cristal líquido nemático (5CB) confinado en una celda híbrida, bajo la influencia simultánea de un campo eléctrico y un gradiente de presión, este último dando lugar a un flujo de Poiseuille. Este trabajo nos permitirá estudiar el comportamiento no-Newtoniano del cristal líquido nemático (5CB), el cual, se debe a la competencia entre los efectos del campo eléctrico, el propio flujo y las condiciones a la frontera en las paredes de la celda.

La tesis está organizada como sigue: En el capítulo 1 hablaremos un poco del descubrimiento de estos increíbles materiales, así como también, de los avances en la investigación de los cristales líquidos a través del siglo XX, en este capítulo también mencionaremos algunas de las generalidades de estos materiales, tal como son: los tipos de cristales líquidos, su clasificación, su elasticidad, etc. En el capítulo 2 presentaremos la hidrodinámica de los cristales líquidos nemáticos, tomando en consideración la nematodinámica de Ericksen, Leslie y Parodi, y la reología de estas sustancias. En el capítulo 3 mencionaremos el modelo que utilizaremos para estudiar el comportamiento del cristal líquido nemático, así como el método de solución para el modelo ya mencionado. En el capítulo 4 presentamos los resultados obtenidos del estudio de la electro-reología de la celda híbrida de cristal líquido nemático. Finalmente el capítulo 5 esta dedicado a las conclusiones de nuestro trabajo.



Glosario de términos

ϵ_{\perp}	Constante dieléctrica perpendicular	40
ϵ_{\parallel}	Constante dieléctrica paralela	40
n_{\perp}	Índice de refracción perpendicular	40
n_{\parallel}	Índice de refracción paralelo	40
K_1	Constante elástica splay (apertura)	23
K_2	Constante elástica twist (torsión)	23
K_3	Constante elástica bend (pandeamiento)	23
α_1	Coefficientes de viscosidad de Leslie	39
α_2	Coefficientes de viscosidad de Leslie	39
α_3	Coefficientes de viscosidad de Leslie	38
α_4	Coefficientes de viscosidad de Leslie	39
α_5	Coefficientes de viscosidad de Leslie	39
α_6	Coefficientes de viscosidad de Leslie	39
σ_{ij}	Tensor de esfuerzos	35
n	Director (vector unitario)	22
V	Tensor de velocidad del esfuerzo de corte	36
N	Rotación del director relativa al fluido	37
ω	Velocidad angular	37
η_a	Coefficiente de Miezwicz	38
η_b	Coefficiente de Miezwicz	38
η_c	Coefficiente de Miezwicz	38



η	Viscosidad	43
E	Campo eléctrico	47
ϵ_0	Permitividad en el vacío	47
ϵ_a	Anisotropía dieléctrica del cristal líquido	47
n_e	Índice de refracción extraordinario	47
I	inercia rotacional	48
γ	Fricción viscosa	48
q	Variable que representa el campo eléctrico	53
m	Variable que representa la diferencia de presión	53
τ	K_3/K_1	53
ζ	Espesor de la celda	53
\tilde{D}_{low}	Fuerzas de arrastre en la placa inferior	68
\tilde{D}_{up}	Fuerzas de arrastre en la placa superior	68



Capítulo 1 Antecedentes

➤ Historia de los cristales líquidos

La mayoría de los materiales sólidos dan lugar a líquidos isotrópicos directamente al fundirse, los materiales isotrópicos tienen propiedades que no dependen de la dirección en que se miden. 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.

A diferencia de los cristales sólidos, en los cristales líquidos existe una relativa debilidad de las fuerzas de interacción molecular, es decir, que la orientación del eje óptico se puede variar con mayor facilidad, esto puede realizarse al aplicárseles un campo externo. Al tocar un cristal líquido, se siente jabonoso y pegajoso, y en efecto, la mezcla pegajosa que se encuentra en el fondo de un recipiente de jabón es un genuino cristal líquido no muy diferente del material de una pantalla de laptop.

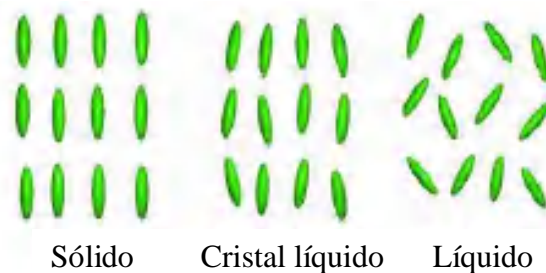


Figura 1.1 Representación del orden molecular de un sólido, un líquido y un cristal líquido.

Estos cristales fueron descubiertos en 1888 por el Botánico Austriaco F. Reinitzer quien encontró que algunos compuestos orgánicos derivados del colesterol parecían tener dos puntos de fusión. El botánico observó que a los 145 °C, el Colesteril Benzoato se transformaba en un líquido turbio; pero éste a su vez, se convertía en un líquido totalmente claro y transparente precisamente a los 179 °C. Reinitzer también realizó el proceso inverso y enfrió el líquido transparente observando que, exactamente a las mismas temperaturas anteriores, ocurrían las transformaciones opuestas. Reinitzer mandó muestras de esta sustancia a Lehmann, físico alemán, quien estaba estudiando las propiedades de cristalización de varias sustancias. Lehmann al observar el comportamiento de esta sustancia se dio cuenta de que estaba frente a un nuevo estado termodinámico de la materia. Lehmann primero se refirió a estas sustancias como cristales suaves, después usó el nombre de fluidos cristalinos pero al pensar que estas sustancias tenían propiedades de líquidos y cristales, fue entonces que comenzó a llamarlas cristales líquidos.



Por otro lado, una de las clasificaciones de los cristales líquidos se le atribuye a Georges Friedel en 1922, quien los dividió en nemáticos, esmécticos y colestéricos. Después de esto, hubo cierta experimentación con respecto a sus propiedades elásticas; sin embargo, a pesar de que inicialmente los cristales líquidos despertaron gran interés y fueron muy estudiados durante el primer tercio del siglo XX, pronto fueron relegados a un rincón de la física y cayeron rápidamente en el olvido subsistiendo sólo como curiosidad de laboratorio.

Fue hasta principios de los años sesenta del siglo pasado, cuando los cristales líquidos son recordados, comenzando su resurgimiento hasta convertirse en uno de los campos más activos en la investigación científica interdisciplinaria con enormes posibilidades de aplicación tecnológicas, tal como lo podemos ver hoy en día [1].

➤ **Aplicaciones de los cristales líquidos**

En los últimos 30 años se ha descubierto que los cristales líquidos ocupan un lugar único en la naturaleza; se sabe que los cristales líquidos desempeñan un papel fundamental en los organismos vivos, ya que el DNA forma diversas fases líquido cristalinas; también se les utiliza para fabricar dispositivos electrónicos, como los indicadores electro-ópticos que muestran letras y símbolos diversos en las calculadoras de bolsillo o en los relojes electrónicos modernos. Por otro lado, se han fabricado pantallas de TV muy delgadas y han hecho posible el desarrollo de ventanas o cortinas que con sólo accionar un interruptor se hacen transparentes o totalmente opacas.

Tratando estas aplicaciones de forma mas especifica podemos mencionar que los cristales líquidos nemáticos, tienen aplicaciones importantes en la elaboración de pantallas, un ejemplo de esto, es la creación de un monitor que no consume energía (“monitores de energía cero”). Este tipo de monitores utilizan cristales líquidos nemáticos pero pueden retener una imagen sin consumir electricidad. A pesar de que se requiere energía eléctrica para actualizar la imagen, es una mejora con respecto a las pantallas actuales que requieren electricidad de manera constante, aunque sea para una imagen estática.

Por otro lado los cristales líquidos colestéricos son usados como indicadores de temperatura, ya que su “pitch” (el cual se veremos a fondo más adelante) está regularmente en el rango de longitud de onda visible y es fuertemente dependiente de la temperatura, de lo anterior su color reflejante puede cambiar con la temperatura cuando es visto bajo la luz blanca.

Los esmécticos han sido aplicados como lubricantes, pues estos pueden deslizarse fácilmente a lo largo de las superficies. Ahora bien, existen nuevas



ideas de aplicación para los cristales líquidos, una idea reciente en la que se está trabajando actualmente es el papel electrónico. En este podría escribirse como cualquier papel normal, pero podría ser borrado y escribirse nuevamente. Esta nueva forma de almacenamiento de datos sería muy conveniente porque no utiliza la iluminación posterior y, por lo tanto, consumiría menos energía y sería más benigna para la vista.

También se están desarrollando métodos para utilizar cristales líquidos para almacenar datos ópticos en las computadoras. Las distintas pruebas que se han realizado muestran que aproximadamente 2.5 cm^2 de estos cristales líquidos pueden almacenar hasta 3 giga bites de información. Como podemos observar son sustancias que aún tienen muchos avances tecnológicos que ofrecernos [3].



Acciones exteriores	Campo de empleo	Tipo de cristal líquido
Temperatura	<ul style="list-style-type: none"> • Indicadores de temperatura • Registro térmico con el rayo láser • Filtros ópticos • Visualización de emisiones y holografía • Autoenfoco térmico de la luz • Artículos decorativos y joyería 	<p>Colestéricos</p> <p>Colestéricos, esmécticos A</p> <p>Colestéricos, nemáticos</p> <p>Colestéricos nemáticos</p> <p>Nemáticos</p> <p>Colestéricos</p>
Presión y otras acciones mecánicas	<ul style="list-style-type: none"> • Óptica acústica (visualización de emisiones acústicas, etc.) • Visualización de corrientes • Control de la calidad de artículos sin destrucción • Captadores de presión 	<p>Nemáticos</p> <p>Nemáticos, colestéricos</p> <p>Nemáticos</p> <p>Esmécticos C (ferroeléctricos)</p>
Impurezas químicas	<ul style="list-style-type: none"> • Análisis de mezclas de gas • Criminología 	<p>Colestéricos</p> <p>Colestéricos</p>
Campo electromagnético	<ul style="list-style-type: none"> • Pantallas electro ópticas • Moduladores y filtros ópticos dirigidos • Materiales para la óptica no lineal • Control de los circuitos eléctricos sin su destrucción • Electrofotografía • El registro fotoquímico de la imagen 	<p>Nemáticos, colestéricos, esmécticos</p> <p>Nemáticos</p> <p>Esmécticos C (ferroeléctricos)</p> <p>Nemáticos</p> <p>Colestéricos</p> <p>Colestéricos</p>
Emisión corpuscular	Dosímetros de radiación	Colestéricos, esmécticos

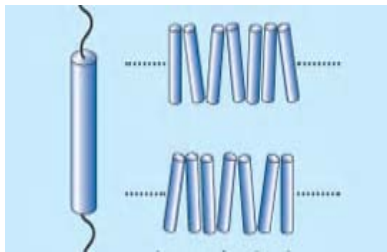
Tabla 1.1 Aplicación de los cristales líquidos.



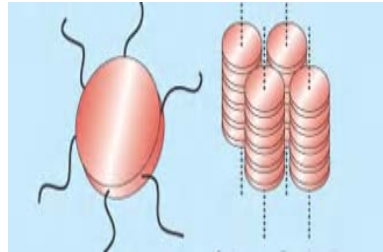
➤ Clasificación de los cristales líquidos

En este apartado mencionaremos algunas de las clasificaciones más importantes, ya que existen muchas clasificaciones para estas sustancias, sea por su forma molecular, hasta por su simetría. Los cristales líquidos se clasifican por la estructura geométrica de sus moléculas de la siguiente forma:

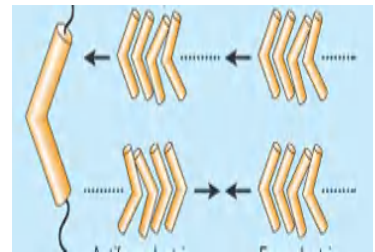
Los cristales líquidos derivados de las moléculas en forma de varillas (un eje es más largo que los otros dos) son llamados **“calamíticos”**, esta clase de materiales han sido altamente investigados y muy usados para la aplicación práctica. Otra forma de las moléculas de los cristales líquidos es la forma de discos (un eje molecular es más pequeño que los otros dos) a estos se les llama **“discóticos”**. Y por último existe una tercer forma de los cristales líquidos, la cual es muy parecida a los calamíticos (Un eje es más largo que los otros dos) sin embargo, en esta forma, las moléculas están pandeadas, por lo cual se les llama moléculas tipo **“banana”** [4].



Molécula de cristal líquido
Calamítico

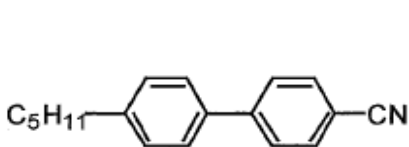


Molécula de cristal líquido
Discótico

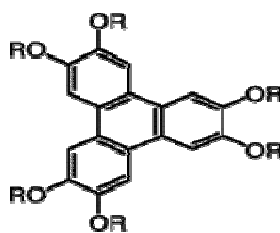


Molécula de cristal líquido
Tipo “Banana”

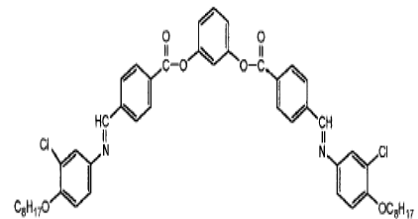
Figura 1.2 Formas de los tipos de moléculas de cristal líquido.



a)



b)



c)

Figura 1.3 Ejemplos de estructuras químicas de cristales líquidos a) Calamítico, b) Discótico c) tipo “Banana”.



A su vez, los cristales líquidos calamíticos fueron divididos en tres principales clases de acuerdo a su arreglo molecular. La primera clase son los “**nemáticos**”, esta es la fase más simple de los cristales líquidos, en esta fase las moléculas mantienen orden de dirección orientacional pero no tienen un orden posicional. Las moléculas de esta fase pueden moverse lateralmente, girar alrededor del eje común o se deslizan paralelamente a él.

La segunda clase son los “**esméticos**”, en esta fase los centros de masa están organizados en capas, el eje orientacional es perpendicular a las capas, en la mayoría de los esméticos las moléculas son móviles en dos direcciones y pueden rotar sobre un eje, existen diferentes tipos del estado esmético, es decir, esmético tipo A, B, C, D, etc. El orden alfabético de la designación de nuevos tipos de estado esmético en total, refleja la complejidad creciente de la estructura de los cristales líquidos, los cuales no muestran la solidez de todas las dimensiones. Es fácil comprender que las combinaciones de las redes cristalinas de distinto tipo, con orientaciones diferentes de las moléculas en estas redes, son muy numerosas. A decir verdad, se han descubierto cerca de una docena de estas combinaciones [4].

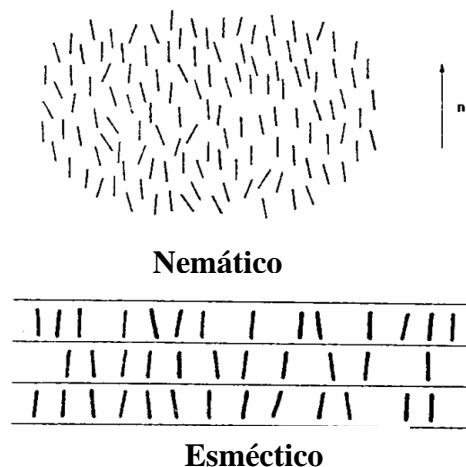


Figura 1.4 Distribución molecular en las fases (A) nemática, (B) esmética.

La tercera clase son los “**colestéricos**”, los cuales poseen una estructura molecular característica de muchos compuestos que contienen colesterol y por esta razón se les asignó ese nombre. Como los esméticos, las moléculas de los cristales líquidos colestéricos también pueden acomodarse en capas superpuestas pero en este caso los ejes moleculares se orientan en una dirección paralela al plano mismo de las capas. Mas aún, esta dirección cambia ligeramente de capa a capa debido a la peculiar estructura molecular de los colestéricos y en consecuencia su eje de orientación, al pasar de un plano a otro, describe una trayectoria en forma de hélice. La fase colestérica puede observarse más claramente en la Figura 1.5.

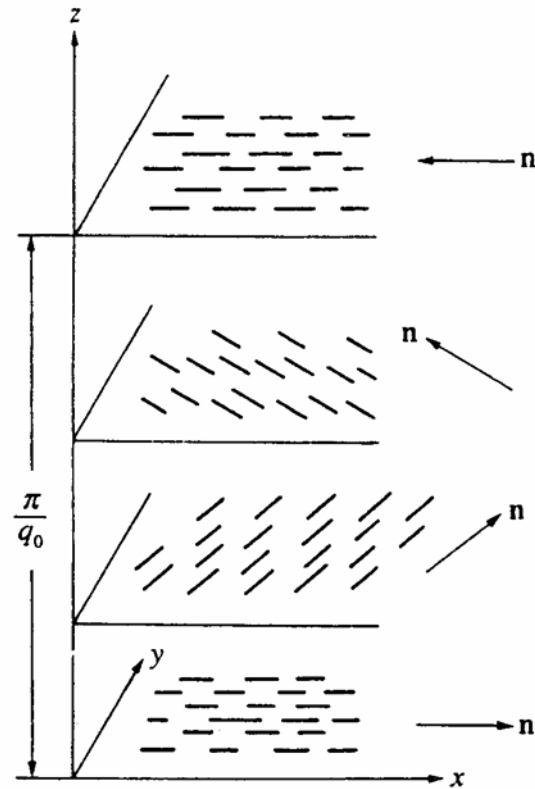


Figura 1.5 Estructura de un cristal líquido colestérico. El director rota 180° en una distancia dada por π/q_0 , el cual es la mitad de un pitch.

Las moléculas en forma de disco también tienen clasificaciones con respecto a su orientación y orden. Entre las principales están la “**nemática**”, “**columnar ordenada**”, “**columnar desordenada**”, “**columnar inclinada**” y “**colestérica**”, las cuales mantienen la estructura referente a su nombre.

Con el fin de que se entienda mejor el pitch que se presenta en los cristales líquidos colestéricos, en la figura 1.6 se muestra de manera más clara una representación de un cristal líquido colestérico visto de forma lateral. Al tener esta perspectiva de la estructura que forman los cristales líquidos antes mencionados, se puede observar y entender mejor el pitch, en esta figura se puede apreciar claramente la distancia a lo largo de la hélice del cristal líquido colestérico sobre la cual el director rota 360° . Lo anterior permite que ocurran efectos ópticos muy interesantes cuando la longitud de onda de la luz en el cristal líquido es igual al pitch. Este pitch tiene una longitud aproximada de 100 nm [5].

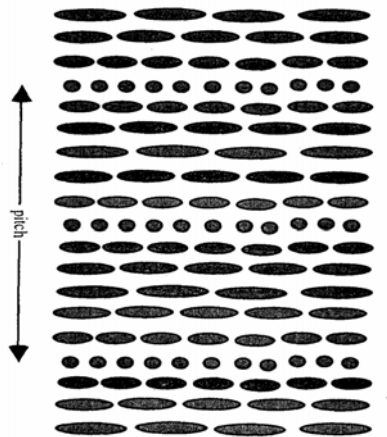


Figura 1.6 Estructura de la fase colestérica.

Otra de las clasificaciones es por la transición de la mesofase (fase intermedia, es decir, en nuestro caso, entre sólido y líquido), ésta puede realizarse por dos caminos diferentes. El primero consiste en un proceso puramente termal, a los cuales se les llama **“termotrópicos”**. En el segundo camino la transición de la mesofase es por la influencia de un solvente, a estos se les llama **“liotrópicos”**.

Ya que en la fórmula de una molécula de cristal líquido liotrópico se combina un grupo hidrofóbico con un grupo hidrofílico, estas moléculas forman estructuras ordenadas en solventes polares y no polares. En estas moléculas existe un grupo polar (cabeza) unido a un grupo hidrocarbónico (cola). Cuando se disuelve en un solvente polar tal como el agua, las colas se ensamblan juntas y presentan las cabezas hidrofílicas hacia el solvente. A la estructura resultante se le llama **“micela”** y para los fosfolípidos es llamada **“vesícula”**.

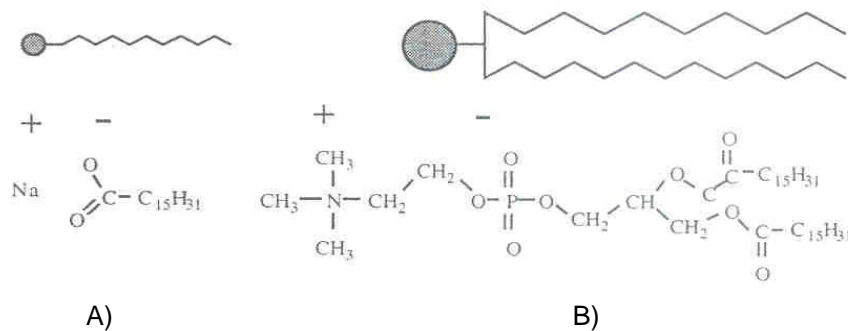


Figura 1.7 Dos cristales líquidos liotrópicos. A) Jabón, B) Fosfolípido.

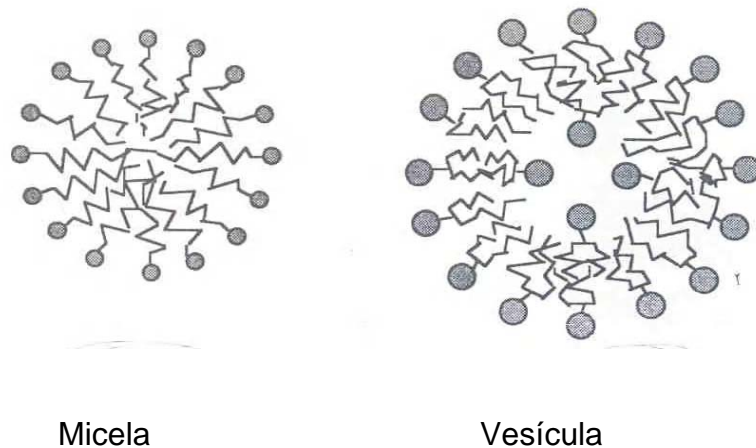


Figura 1.8 Estructuras formadas por moléculas anfífilas en solventes polares.

A su vez estos cristales líquidos liotrópicos tienen ciertas clasificaciones con respecto a la estructura de la fase que forman, entre las que han sido identificadas están la “**laminar**”, la “**hexagonal**” y la “**cúbica**”.

Existen otras clasificaciones tales como son las de fases “**no ferro eléctricas**” y “**ferro eléctricas**” dependiendo de su simetría. Por ejemplo, todas las fases esméctico quiral con estructuras inclinadas muestran propiedades ferro eléctricas. Debido a sus bajas simetrías, son capaces de mostrar polarización espontánea y propiedades piezoeléctricas y son conocidos como “**cristales líquidos ferro eléctricos**”. Mientras que el arreglo colestérico también conocido como “quiral nemático” debido a su estructura de hélice no puede ser ferro eléctrico [7].

➤ **Orden orientacional y elasticidad de los cristales líquidos**

Los experimentos han demostrado que la fase nemática son cristales líquidos anisotrópicos, es decir, que sus propiedades no son las mismas en todas las direcciones espaciales. Las moléculas están distribuidas aleatoriamente pero tienden a alinearse paralelas una con otra. Sin embargo, en algún momento, las moléculas se inclinan en un pequeño ángulo hacia una dirección promedio, a la cual se orientan todas las moléculas. Esta dirección promedio es llamada “**director**” y se denota por el vector \mathbf{n} .

Con respecto a la dirección que toma el vector \mathbf{n} , este tiene la misma probabilidad de escoger cualquier dirección espacial, en otras palabras, podemos decir que cada dirección corresponde a la misma energía. Consecuentemente, una perturbación externa débil es capaz de modificar la orientación, la cual no es generalmente muy constante en toda la muestra. La dirección local puede ser impuesta por posicionamiento de las moléculas sobre la superficie de un sólido, por efectos de flujos o por un campo electromagnético.



Para poder comprender estos efectos, debemos indagar en la energía asociada con deformaciones lentas y continuas. De lo anterior, podemos describir tres deformaciones fundamentales, “**splay**” (deformación por apertura), “**twist**” (deformación por torsión) y “**bend**” (deformación por pandeamiento).

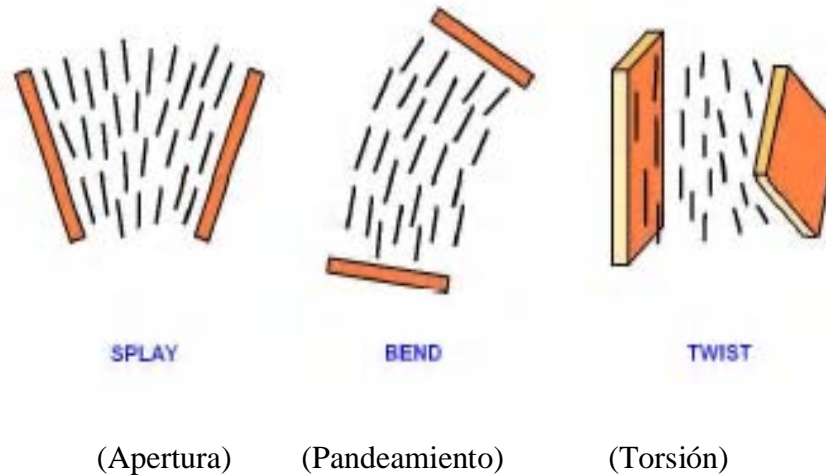


Figura 1.9 Deformaciones fundamentales que presenta el director en los cristales líquidos

Existen algunas deformaciones que se presentan en los cristales líquidos nemáticos, las cuales no afectan el orden orientacional de largo alcance, por ejemplo, deformaciones tales como la ocasionada por un esfuerzo de corte, en este caso, no se aprecia ningún incremento en la energía elástica. Sin embargo, existen deformaciones tales como la deformación por apertura, en la cual, sí existe una perturbación en el orden de largo alcance, por lo cual se puede apreciar un incremento en la energía elástica.

Dentro de los factores que se pueden controlar para darle una aplicación a los cristales líquidos, está la dirección del director de las partículas que se encuentran junto a las placas que contienen el cristal líquido conocido como “**anclaje**”. Por ejemplo, un indicador electro-óptico consta básicamente de una celda diminuta con los siguientes elementos: una capa muy delgada de cristal líquido, que por lo general es un nemático, colocado entre dos placas de vidrio cada una de las cuales está unida a un polarizador. Estas placas se pulen de manera, tal que la cohesión entre las moléculas y las placas sólidas sea máxima, lo cual se logra produciendo surcos en las placas de aproximadamente las dimensiones de la molécula del nemático. Así se consigue que las moléculas que están en contacto con las placas se alineen con la dirección del pulimento (anclaje). Después, cada una de las placas se coloca en cierta dirección, se agregan espejos al sistema, una vez realizando esto, el sistema se puede manipular a través de un campo eléctrico, para cambiar la dirección del director de las moléculas de cristal líquido, para que el espectador vea la celda perfectamente clara u oscura dependiendo del campo eléctrico [1].



➤ La química de los cristales líquidos

Para estudiar las propiedades de los cristales líquidos, es de suma importancia tener claramente definidas las temperaturas de transición. En general, estas temperaturas dependerán de la pureza del compuesto. El criterio básico de la pureza es el valor y la precisión del punto de fusión. Esto último se debe a que, al tener la presencia de otra sustancia en algún compuesto, se altera el valor del punto de fusión. Para los cristales líquidos, el punto de aclaración provee un criterio adicional para determinar la pureza de estos materiales. En una mezcla binaria la temperatura de aclaración usualmente varía con respecto a la composición, de igual forma pasa en los cristales líquidos. También es importante mencionar, que las propiedades eléctricas de los cristales líquidos son principalmente determinadas por la presencia o ausencia de conjugación (alternación de enlaces dobles o simples).

Estructura molecular básica de los cristales líquidos calamíticos

La mayoría de las moléculas de cristal líquido son altamente anisotrópicas y para una buena aproximación, éstas pueden ser consideradas como varillas rígidas con un largo, determinado por l , más grande que su ancho, determinado por d . Los rangos de peso molecular son de algunos cientos de Daltons para masas moleculares bajas de cristales líquidos, y de cientos o miles de Daltons para cristales líquidos poliméricos.

La estructura básica de las masas moleculares bajas de los cristales líquidos, o los monómeros de los cristales líquidos poliméricos, se representa esquemáticamente a continuación.

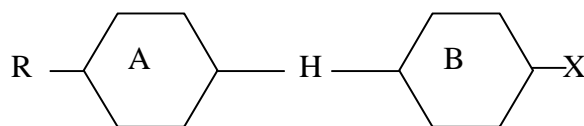


Figura 1.10 Estructura básica de los cristales líquidos de baja masa molecular.

Donde X es un grupo vecino, R es un grupo terminal, A y B son anillos aromáticos y H es un grupo de enlace



1.- Grupo vecino

Las siguientes cadenas laterales han sido extensamente estudiadas: grupo alquil (C_nH_{2n+1}); grupo alcoxi ($C_nH_{2n+1}O$) y alquenil (C_nH_{2n-1}) o grupo alqueniloxi ($C_nH_{2n-1}O$). El largo y la flexibilidad de la cadena lateral tienen su influencia sobre el tipo de fase del cristal líquido, y la fase de transición. En general, para los homólogos, los compuestos con pocos carbonos no muestran una fase mesogénica, cuando se incrementan los carbonos, aparece la fase monotrópica del cristal líquido, cuando se incrementan aún más los carbonos ocurren la fase nemática del cristal líquido y después pueden aparecer fases esmécticas. Como los carbonos varían de par a impar, los compuestos con un número de carbonos impar en la cadena tienen una temperatura de transición alta, mientras que los compuestos con un número de carbonos par en la cadena tienen una temperatura de transición baja.

2.- Grupo terminal

El grupo terminal primeramente contribuye para la anisotropía dieléctrica y los índices de refracción, los cuales a su vez afectan la entrada del voltaje y las propiedades ópticas en algunas aplicaciones, respectivamente. Algunos grupos terminales son alquil, alcoxi, ciano, nitro, isocianato (NCS), etc.

3.- Anillos aromáticos.

La mayoría de los compuestos de los cristales líquidos tienen dos o más anillos aromáticos. Estos anillos aromáticos pueden ser un ciclohexano saturado totalmente, un ciclociclohexano, un bifenil insaturado, un terfenil, o combinaciones de estos últimos.

4.- Grupo de enlace

El grupo de enlace hace una importante contribución para la fase de transición y para las propiedades físicas del cristal líquido tal como es la birrefringencia. Dentro de los principales grupos de enlace están:

(1) Grupos saturados, tal como el etileno(C_2H_4)

(2) Esteres

(3) Los grupos insaturados que contienen un doble enlace o un triple enlace tal como el acetileno o el diacetileno.

5.- Grupo lateral



El grupo lateral se puede ubicar en el lugar del grupo vecino, al sustituir el hidrógeno en la posición 2-, 3-, o 4- de un anillo fenil, por un ciano, fluoro, o un grupo polar cloro, con ésto se pueden modificar las propiedades físicas de los cristales líquidos. En la mayoría de los casos, la sustitución lateral ampliará la molécula, esto reducirá las atracciones laterales y bajará la estabilidad de las fases nemática y esméctica.

6.- Centro quiral

Remplazando el grupo terminal por un centro quiral, pueden obtenerse el nemático quiral y las fases esmécticas. Las moléculas de cristal líquido son generalmente de 2-5 nm en lo largo y 0.4-0.6 nm en lo ancho.

Estructura molecular básica de los cristales líquidos discóticos

Estos cristales líquidos están formados por un centro aromático plano y rígido conectado con 3, 4, 6, 8, 9 cadenas laterales flexibles, algunos ejemplos de moléculas de cristal líquido discótico se muestran en la siguiente figura:

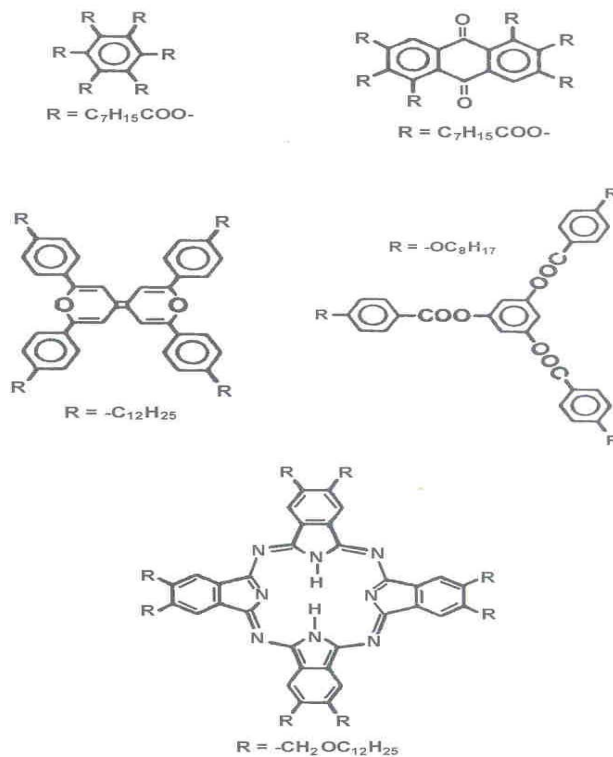


Figura 1.11 Ejemplo de cristales líquidos discóticos.

Generalmente las moléculas de cristal líquido discótico cuentan con un grosor de alrededor de 1 nm.



Cristales líquidos anfílicos

Otro importante miembro de la familia de los cristales líquidos es la solución de moléculas anfílicas. Estos cristales líquidos se caracterizan por tener una parte hidrofílica y otra hidrofóbica. En la figura 1.12 se muestran algunos ejemplos de lo anterior. El jabón en solución, por ejemplo, es un cristal líquido. En un extremo de su molécula tiene $-\text{COO}-\text{Na}^+$ el cual es un grupo polar y es soluble en agua, mientras que en el otro extremo de la molécula cuenta con $\text{CH}_3(\text{CH}_2)_{14}$, el cual es insoluble en agua.

Los materiales cristalinos líquidos muestran su comportamiento de cristal líquido en diferentes formas. Algunos de ellos exhiben la mesofase en un cierto rango de temperatura, mientras que otros muestran la mesofase de acuerdo a la concentración con la que cuentan en la solución [11].

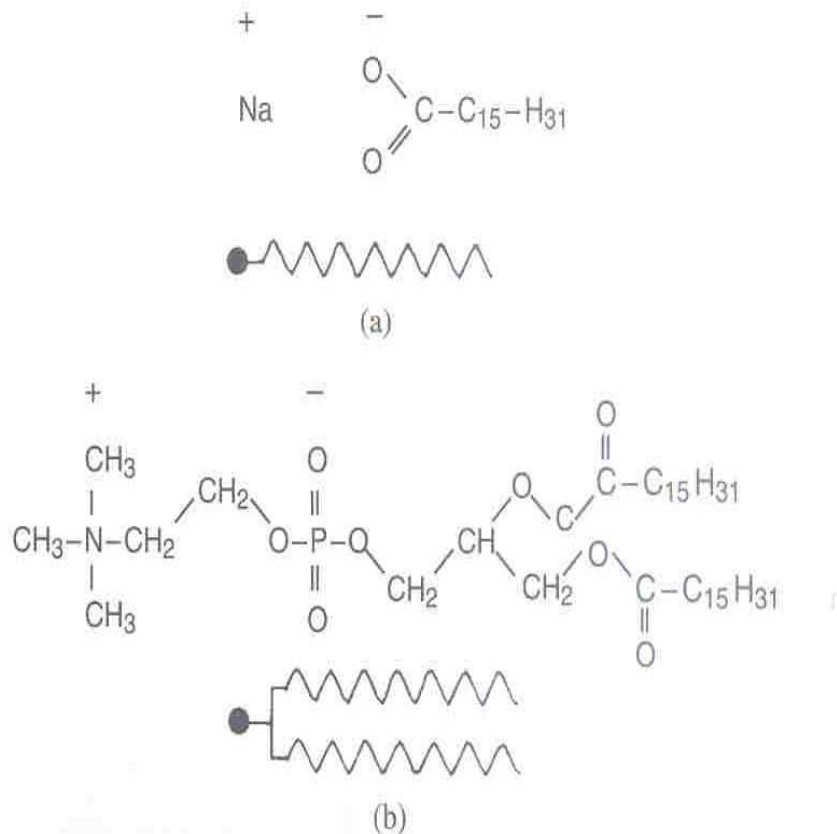


Figura 1.12 Dos moléculas de cristal líquido anfílicas: a) Laurato de sodio b) dipalmitoilfosfatidilcolino.



Clases químicas de los cristales líquidos

Dentro de los diversos miles de compuestos de cristal líquido que han sido identificados, existen varios tipos químicos que son representativos como se puede ver en la tabla 1.2













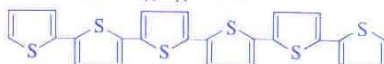



Class of compound	Formula of a representative material and conventional abbreviation	Transition temperatures (°C)				
		T_{CS}	T_{CN}	T_{SN}	T_{CCh}	T_{Iso}
Acyclic	$CH_3(CH_2)_7=CH(CH_2)_7COOH$	11.7	—	—	—	15.5
Isocyclic	C_5H_{11} -  -COOH	—	54	—	—	105
Aromatic	CH_3O -  -  -  - OCH_3 (PAA)	118	—	—	—	135.5
	CH_3O -  - $CH=N$ -  - C_4H_9 (MBBA)	22	—	—	—	47
	C_2H_5OCO () ₄ $COOC_2H_5$	284	—	—	—	367
	C_5H_{11} -  -  -CN (5 CB)	—	22.5	—	—	35
Heterocyclic	C_9H_{19} -  -  -  - C_9H_{19}	140	—	146	—	151.5
						
Organo metallic	$(CH_3O$ -  - $CH=N$ -  -) ₂ Hg	—	209	—	—	285
Steroids	$C_{12}H_{25}COO$ - 	63.5	—	—	79	85
Organic acid salts	$(CH_3)_2CHCOOH$	240	—	—	—	335

Tabla 1.2 Ejemplos de compuestos de cristales líquidos de varios tipos químicos.
(Temperaturas de transición: cristal a esméctico T_{CS} , esméctico a nemático T_{SN} , cristal a colestérico T_{CCh} , punto de aclaración de los cristales líquidos T_{Iso})

Los compuestos acíclicos forman un pequeño grupo de cristales líquidos, principalmente del tipo esméctico. Básicamente, estos son ácidos grasos insaturados y sus derivados. Diversos esteres de bis-carbonilo (ácidos amino) también pueden ser clasificados en este grupo. Los ácidos saturados del tipo $CH_3(CH_2)COOH$ pueden ser considerados como prototipos moleculares, los cuales tienen compuestos hidrofílicos e hidrofóbicos, como mencionamos anteriormente forman compuestos liotrópicos.



Los cristales líquidos isocíclicos forman una gran clase, algunos de estos últimos no contienen anillos de benceno, tal como se puede ver en la tabla 1.2 con el 4-alkil-trans-ácido ciclohexanocarboxílico. Sin embargo, esto no es una regla general para todos los cristales líquidos isocíclico tal como se puede ver en los cianofenilciclohexanos

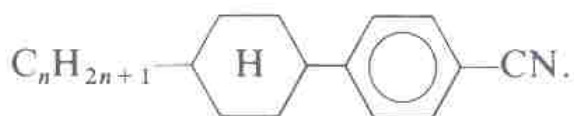


Figura 1.13 Representación general de los cianofenilciclohexanos

Los derivados de bicicloóctanos son también clasificados con los compuestos isocíclicos. Dentro de estos últimos, existen cristales líquidos que cuentan con una fase nemática, en un rango de temperatura de 104 a 106 °C.

Dentro de la gran familia que conforma a los cristales líquidos, más de la mitad son derivados del benceno. Una importante proporción de estos puede ser representada por las siguientes formulas:

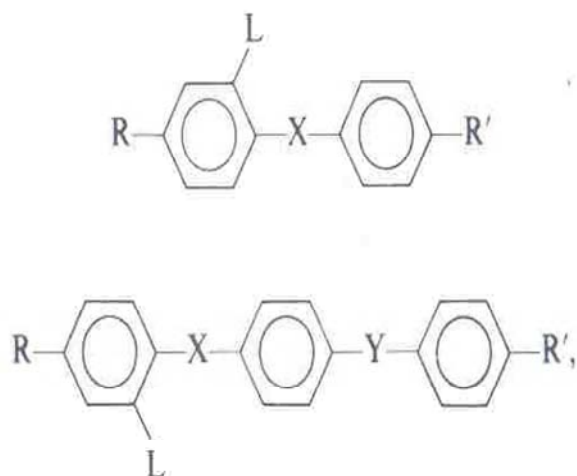


Figura 1.14 Formulas generales para los cristales líquidos derivados del benceno.

Donde los grupos terminales R y R' son alquil, alcoxil, aciloxil, alquilcarbonato, alcoxycarbonil, sus análogos fluorinados, nitro-, o grupos ciano, $L = H$ u otro grupo lateral, X y Y son simples enlaces o grupos de enlace tal como $(-N=N)$, $(-CH=CH-)$, o también $(-CH=N)$, $(-COO-)$, $(-C\equiv C-)$, $(-CH_2-CH_2)$, etc.



La mayoría de los cristales líquidos heterocíclicos conocidos (cerca de 1000) tienen estructuras similares a los derivados del benceno, pero con uno o más anillos de benceno remplazados por piridina (Py), pirimidina (Pm), pirazolina (Pz), Piridazina (Pd), o anillos de 1, 2, 3, 4, 5-tetrazina (Tz). Los esquemas de estos últimos pueden observarse a continuación:

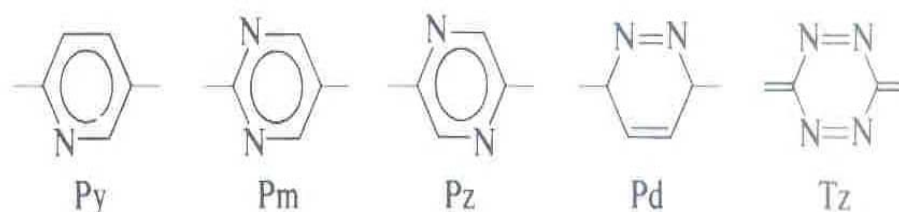


Figura 1.15 Reemplazos de los anillos de benceno en los cristales líquidos heterocíclicos.

Ahora bien, los cristales líquidos también han sido sintetizados en otra clase de heterocíclicos, los derivados de tiofeno (Thi), 1, 3, 4-tiadiazolo (Thid), piran (Pyr), 1, 4, dioxano (Do), quinolino, (Ql), y benzotiazolo (Bthi).

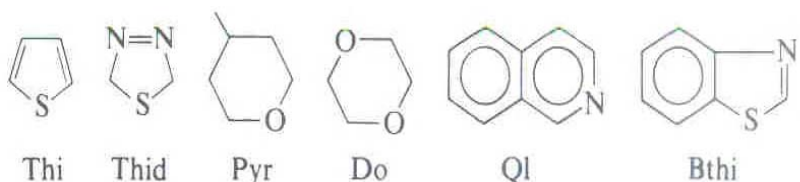


Figura 1.16 Reemplazos de los anillos de benceno en los cristales líquidos heterocíclicos.

Aunque los cristales líquidos órgano metálicos son complejos, son de gran interes en el estudio de fenómenos magnetoópticos en cristales líquidos cuando ellos contienen átomos paramagnéticos [2].

➤ **Respuesta de los cristales líquidos a un campo eléctrico**

Las propiedades electromagnéticas en los cristales líquidos fueron descubiertas por Frederiks en 1943, él observó que el eje óptico de un cristal líquido cambia de dirección bajo la acción de un campo eléctrico. Aunque los cristales líquidos son fluidos, el hecho de que las moléculas estén orientadas en promedio a lo largo de una cierta dirección en el espacio tiene un profundo efecto sobre sus propiedades. Cuando se aplican campos eléctricos a las moléculas, éstas experimentan diferentes tipos de fuerzas, esto es, si la molécula es cargada positivamente, experimenta una fuerza en la dirección del campo y en dirección opuesta al campo si es cargada negativamente, esta fuerza tiende a mover la molécula hacia una de esas dos direcciones.



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 están alineados, aun si el orden orientacional está presente.

Pero esta situación es muy diferente si se aplica un campo eléctrico. 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 estén alineadas con el campo eléctrico. 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 es incrementada, las fuerzas se incrementan tendiendo a orientar la molécula hacia una cierta dirección.

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 este sólo está presente si existe 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.

Si un campo eléctrico es aplicado perpendicularmente al director, los dipolos eléctricos perpendiculares al eje longitudinal de las moléculas se juntan para dar una polarización eléctrica paralela al campo y perpendicular al director. Para cada cristal líquido, la polarización eléctrica paralela al director, será diferente de la polarización eléctrica perpendicular al director, aun si el campo eléctrico utilizado para producirlos es el mismo. La polarización eléctrica será grande dependiendo de cual dipolo eléctrico (a lo largo o a través del eje longitudinal de la molécula) sea grande. Entre más grande sea la diferencia en las dos polarizaciones eléctricas, más pequeño será el campo eléctrico necesario para orientar al cristal líquido. Entre más grande sea el campo eléctrico aplicado al cristal líquido, más grande es la polarización. En muchos casos, la relación de la polarización y la fuerza del campo eléctrico son constantes, pero difiere dependiendo de si el campo eléctrico es aplicado paralelamente o perpendicularmente al director. Esta relación es conocida como *susceptibilidad eléctrica* y es una medida que nos indica que tan propenso es un material a ser polarizado por un campo eléctrico.



Esto último se puede ver de manera más clara en la figura 1.17 que muestra la anisotropía dieléctrica en un cristal líquido nemático, en el cual hay un dipolo eléctrico permanente paralelo a lo largo del eje de la molécula de cristal líquido, este se muestra sin presencia de carga en el lado izquierdo de la figura; en este no existe un momento dipolar neto. Por el contrario, cuando se aplica un campo eléctrico paralelo al director, como se muestra en la parte de arriba a la derecha de la figura, el campo induce relativamente fácil al dipolo de la molécula de cristal líquido. Ahora bien, si por el contrario, el campo eléctrico se aplica perpendicular al director, como se muestra en la parte de abajo a la derecha de la figura, el grado de polarización es más pequeño. Es por esto que la constante dieléctrica paralela es más grande que la constante dieléctrica perpendicular [5]. En el capítulo dos trataremos un poco más a estas constantes dieléctricas.

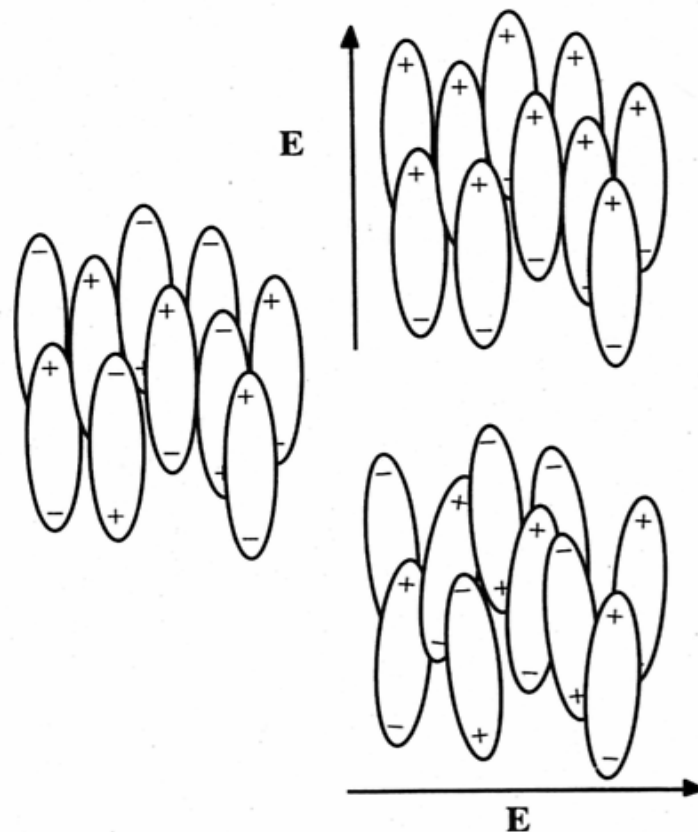


Figura1.17 Representación de las moléculas de cristal líquido nemático sin presencia de campo, con influencia de un campo eléctrico paralelo al director y con influencia de un campo eléctrico perpendicular al director.



➤ Cristal líquido nemático 5CB

El cristal líquido nemático en el cual basaremos nuestro trabajo es el 5CB, esto último es debido a que el cristal líquido 5CB cuenta con un comportamiento nemático a la temperatura ambiente promedio, lo cual facilita su estudio, además de tener un costo relativamente barato. Otra de las razones por las cuales se optó por esta opción, es que los cristales líquidos nemáticos son los más estudiados hasta el día de hoy, por su amplia utilización tecnológica.

El cristal líquido 5CB a 25 °C cuenta con una densidad de 1.0065 g/cm³, su punto de fusión se da a los 24 °C, una constante dieléctrica (estática) $\epsilon_{\perp} = 6.7$ y una constante dieléctrica $\epsilon_{\parallel} = 19.7$, índices de refracción $n_{\perp} = 1.5442$ ($\lambda = 514.5$ nm), $n_{\perp} = 1.5309$ ($\lambda = 632.8$ nm) y $n_{\parallel} = 1.7360$ ($\lambda = 514.5$ nm), $n_{\parallel} = 1.7063$ ($\lambda = 632.8$ nm). Este cuenta valores de constantes elásticas de $K_1 = 6.4$ din x 10⁻⁷, $K_2 = 3$ din x 10⁻⁷ y $K_3 = 10$ din x 10⁻⁷. Ahora bien, a los 25 °C, el cristal líquido 5CB cuenta con los siguientes valores de coeficientes de viscosidad de Leslie en centipoises (cp's): $\alpha_1 = -11$ cp, $\alpha_2 = -83$ cp, $\alpha_3 = -2$ cp, $\alpha_4 = 75$ cp, $\alpha_5 = 102$ cp, $\alpha_6 = -27$ cp.

El cristal líquido 5CB tiene un tamaño de molécula de 2 nm por 0.5 nm, este pertenece a la serie 4-ciano-4 alquilbifenil (n CB) donde n es el número de carbonos (generalmente del 5-12) en la "cola" flexible de la molécula.

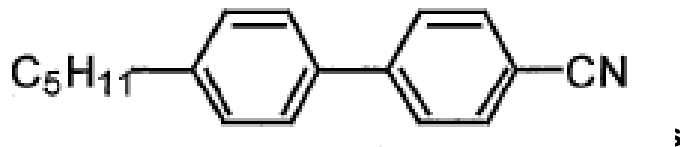


Figura 1.18 Estructura química del cristal líquido 4-ciano-4'-pentilbifenil (5CB)



Capítulo 2

Hidrodinámica de cristales líquidos

Una de las características principales de los cristales líquidos es poder fluir libremente, a pesar de lo cual exhiben varias propiedades cristalinas y anisotrópicas. Esto último se debe a su naturaleza dual de cristal y líquido, y hace a los cristales líquidos, materiales muy interesantes para estudiar, pero al mismo tiempo le confieren cierta complejidad para su estudio.

La principal característica que distingue a los cristales líquidos de los fluidos ordinarios son sus mesofases ordenadas, es decir, que sus propiedades físicas son dependientes de la orientación del eje del director $\mathbf{n}(\mathbf{r})$. Por consiguiente, el estudio de la hidrodinámica de los cristales líquidos puede envolver una gran cantidad de parámetros, inclusive más que los fluidos ordinarios.

➤ Nematodinámica de Ericksen, Leslie y Parodi

Los cristales líquidos nemáticos son los que cuentan con un estudio más amplio debido a que son los de mayores aplicaciones. Para el estudio de su comportamiento hidrodinámico se emplea la nematodinámica de Ericksen, Leslie y Parodi.

Un cambio en el estado del movimiento de un fluido puede ser causado por dos tipos de fuerzas llamadas fuerzas de cuerpo (o de volumen) y fuerzas de superficie. En algunos casos actúan las dos fuerzas.

Las fuerzas de cuerpo penetran el volumen entero del sistema y actúan en todos sus elementos. Un ejemplo obvio de este tipo de fuerza es la gravedad. Una fuerza de cuerpo actuando sobre un elemento de volumen dV es proporcional a este volumen y puede ser escrito como $\rho \mathbf{g} dV$ donde \mathbf{g} es la fuerza por unidad de masa.

Las fuerzas de superficie son causadas por interacciones moleculares directas, incluidas interacciones entre regiones vecinas del mismo medio. La superficie natural de estas fuerzas es causada por un muy pequeño rango de interacciones moleculares, comparadas con escalas características de perturbaciones en un modelo continuo. Las fuerzas de superficie son continuamente representadas por el componente σ_{ij} de un tensor de esfuerzos: σ_{ij} es el componente i de una fuerza de superficie infinitesimal actuando sobre un área de superficie infinitesimal dA_j perpendicular a la coordenada del eje j .

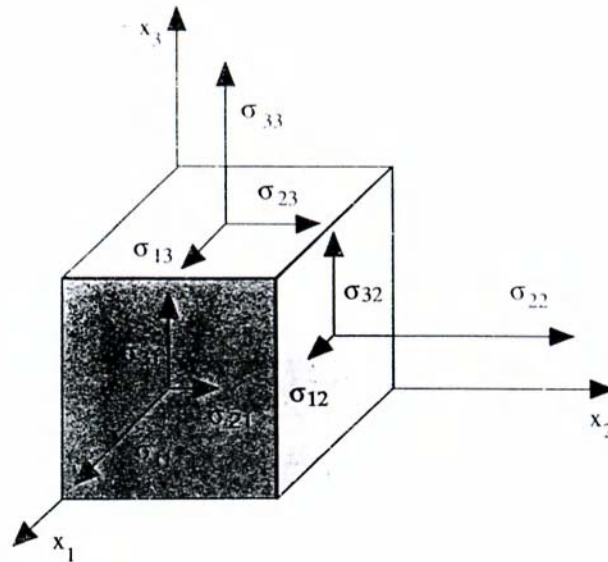


Figura 2.1. Un cubo con un esfuerzo normal y tangencial actuando en sus caras.

Una propiedad fundamental de los cristales líquidos nemáticos, bajo la influencia de un flujo, es que hay un acoplamiento entre el perfil de velocidad $\mathbf{v}(\mathbf{r})$ de las moléculas de cristal líquido y el director $\mathbf{n}(\mathbf{r})$, en el cual \mathbf{r} representa a (x, y, z) . Por lo cual, el flujo perturbará la alineación de la molécula, y a su vez, los cambios en la alineación de la molécula regirán al flujo. Ericksen fue el primero en atacar el problema de la hidrodinámica del acoplamiento del perfil de velocidad y el director, los cuales también fueron estudiados por Leslie, por lo cual su teoría es nombrada por la combinación de sus nombres, agregando tiempo después a Parodi por una simplificación adicional que hizo.

Las personas especializadas en este tema usan diferentes notaciones en las ecuaciones de resolución, en este trabajo se empleará una notación similar a la utilizada en la bibliografía consultada para este trabajo. De lo anterior, la ecuación básica de la teoría de Ericksen, Leslie y Parodi (ELP) puede ser escrita como sigue:

$$\sigma = \alpha_1(\mathbf{n} \cdot \mathbf{V} \cdot \mathbf{n})\mathbf{nn} + \alpha_2\mathbf{nN} + \alpha_3\mathbf{Nn} + \alpha_4\mathbf{V} + \alpha_5\mathbf{n}(\mathbf{n} \cdot \mathbf{V}) + \alpha_6(\mathbf{V} \cdot \mathbf{n})\mathbf{n} \quad (2.1)$$

En esta ecuación es conveniente tratar a los sufijos de notación con la convención de la suma sobre índices repetidos, por lo cual la ecuación anterior puede ser rescrita como:

$$\sigma_{ij} = \alpha_1(n_k V_{kl} n_l) n_i n_j + \alpha_2 n_i N_j + \alpha_3 N_i n_j + \alpha_4 V_{ij} + \alpha_5 n_i n_k V_{kj} + \alpha_6 V_{ik} n_k n_j \quad (2.2)$$



Donde se puede apreciar gracias a la notación de índices repetidos que σ y V son tensores, ya que estos cuentan con dos subíndices; mientras que n y N son vectores ya que cuentan con un solo subíndice. Los seis coeficientes α_1 a α_6 (que pueden ser positivos o negativos) son conocidos como los coeficientes de Leslie, éstos tienen las mismas unidades de la viscosidad (Pa-s). El tensor σ_{ij} representa el esfuerzo de corte viscoso en el cristal líquido nemático. Tal como se muestra en la ecuación (2.1), esto es la suma de los seis términos que expresan los torques desarrollados en el líquido anisotrópico, y estos están asociados con el flujo rotacional y el flujo no-rotacional.

Si se aplica un campo externo, tal como un campo eléctrico E , una segunda ecuación es requerida:

$$E = (\alpha_3 - \alpha_2)N_i + (\alpha_3 + \alpha_2)V_{ik}n_k \quad (2.3)$$

Donde $n \times E$ es el torque por unidad de volumen causado por el campo externo (este torque se debe al campo que tendrá un efecto en la orientación del director independiente de la generada por el flujo.)

En adición a esto, la teoría de Ericksen, Leslie y Parodi asume que el fluido es incompresible y que la magnitud del director es fija. De lo anterior, se ha demostrado que sólo cinco de los seis coeficientes de Leslie son independientes, así que:

$$\alpha_3 + \alpha_2 = \alpha_6 - \alpha_5 \quad (2.4)$$

A esta última relación se le atribuye el nombre de su descubridor, Parodi.

El significado de los símbolos en las ecuaciones ya mencionadas será discutido a continuación:

- 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 de corte, i la dirección de la normal al plano sobre el que se aplica la fuerza. De lo anterior, para la fuerza de corte de un cristal líquido nemático confinado entre dos placas, j podría ser paralela a la dirección del corte, e i podría ser la normal a los planos.
- n : Es el vector unitario que representa el director del cristal líquido nemático.
- V : Representa el tensor de rapidez de deformación, describiendo sólo el cambio en la forma asociada con el flujo, y no con la rotación. Éste es un



tensor simétrico, el cual puede ser expresado en términos de gradientes en el perfil de velocidad:

$$V_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial v_i}{\partial x_j} + \frac{\partial v_j}{\partial x_i} \right). \quad (2.5)$$

Donde \mathbf{v} es la velocidad lineal con componentes v_i .

d) \mathbf{N} : Este es un vector expresando la velocidad, en la cual la orientación del director cambia con el tiempo con respecto al fluido. Éste puede escribirse como sigue:

$$\mathbf{N} = \frac{dn}{dt} - (\omega \times n), \quad (2.6)$$

con

$$\omega = \frac{1}{2} \text{vel. angular}. \quad (2.7)$$

El componente de la *vel. angular*:

$$\omega = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial v_y}{\partial z} - \frac{\partial v_z}{\partial y}, \frac{\partial v_z}{\partial x} - \frac{\partial v_x}{\partial z}, \frac{\partial v_x}{\partial y} - \frac{\partial v_y}{\partial x} \right) \quad (2.8)$$

De lo anterior, la ecuación (2.6) puede escribirse como:

$$N_i = \frac{dn_i}{dt} - \frac{1}{2} \left(\frac{\partial v_i}{\partial x_k} - \frac{\partial v_k}{\partial x_i} \right) n_k \quad (2.9)$$

Los términos α_2 y α_3 en las ecuaciones (2.1) y (2.2) están asociados con los flujos rotacionales y los términos α_5 y α_6 con los flujos no-rotacionales (sin dependencia en la velocidad angular). Esto se puede observar de la ecuación (2.2), ya que los cuatro términos α_2 , α_3 , α_5 y α_6 son equivalentes para los diferentes sentidos que la configuración del director puede tomar en el campo de flujo.



Coeficientes de Miezwicz

Los coeficientes de Miezwicz representan la viscosidad medida en un experimento de corte simple para las tres geometrías mostradas en la Figura 2.3. Estos coeficientes pueden ser relacionados con los coeficientes de Leslie como sigue:

$$\eta_a = \frac{1}{2} \alpha_4 \quad (2.10a)$$

$$\eta_b = \frac{\alpha_4 + \alpha_3 + \alpha_6}{2} \quad (2.10b)$$

$$\eta_c = \frac{\alpha_4 + \alpha_5 - \alpha_2}{2} \quad (2.10c)$$

Ahora bien, puesto que el gradiente de velocidad se da en el eje **X**, en la Figura 2.2 se puede apreciar que, a) η_a representa la viscosidad cuando la orientación de la molécula de cristal líquido es perpendicular con respecto al plano del gradiente de velocidad. b) η_b representa la viscosidad cuando la orientación de la molécula de cristal líquido es paralela con respecto al plano del gradiente de velocidad y c) η_c representa la viscosidad cuando la orientación de la molécula de cristal líquido es perpendicular con respecto a la velocidad pero en el mismo plano del gradiente de velocidad [5].

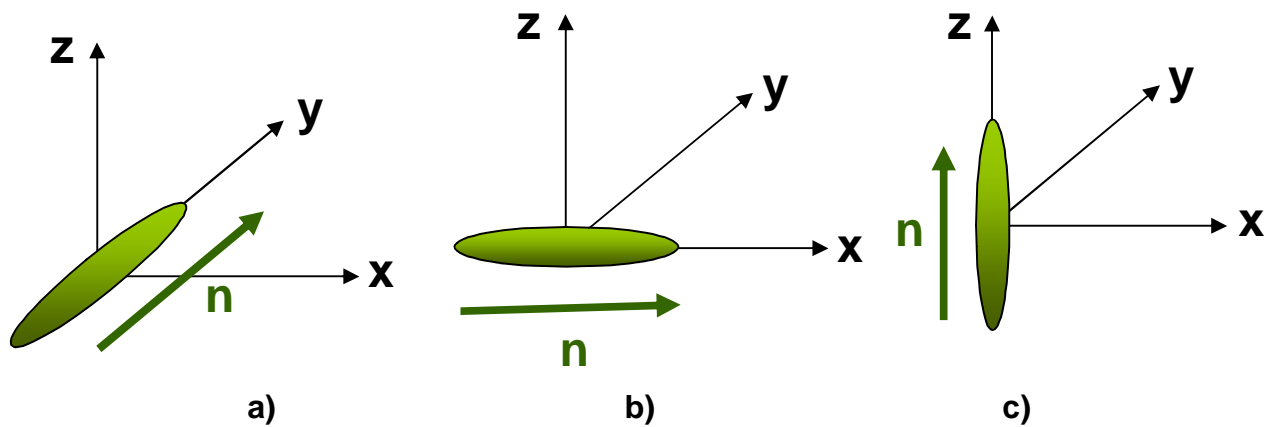


Figura 2.2. Orientación de las moléculas de cristal líquido en los coeficientes de Miezwicz.



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 2.3b y 2.3c. Si el director es orientado en la dirección del flujo tal, como se muestra en la figura 2.3b, 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, tal como se muestra en la figura 2.3c 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 [12]. 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 esta relacionada con el torque del director, pero determina la viscosidad del fluido cuando el director esta orientado en la dirección de la vorticidad [9].

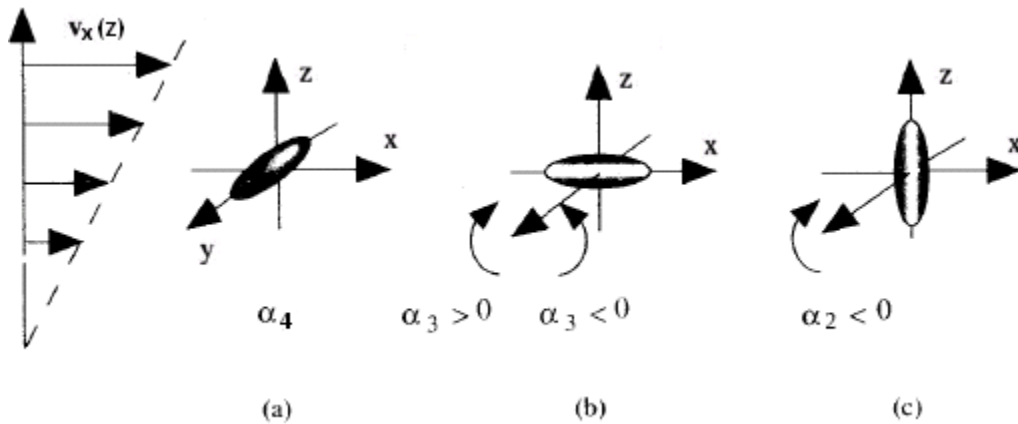


Figura 2.3. Torques viscosos actuando en el campo director en tres geometrías diferentes.



Constantes dieléctricas e índices de refracción

Las constantes dieléctricas y los índices de refracción de los cristales líquidos son parámetros físicos que caracterizan las respuestas electrónicas de los cristales líquidos a campos aplicados externamente (campos eléctricos, campos magnéticos u ópticos). Debido a las estructuras moleculares y a los niveles de energía de las moléculas de cristal líquido nemático, las respuestas mencionadas son altamente dependientes de la dirección y la frecuencia del campo.

Para la mayoría de los cristales líquidos nemáticos $\epsilon_{\parallel} > \epsilon_{\perp}$. En este trabajo es pertinente mencionar que el cristal líquido 5CB cuenta con esta característica, es decir, que este cristal líquido posee una anisotropía positiva. En general ϵ_{\parallel} y ϵ_{\perp} tienen diferentes regiones de dispersión tal como se muestra en la Figura 2.4 para el 4-metoxi-4'-n-butilazoxi-benceno, el cual posee una anisotropía dieléctrica negativa ($\Delta\epsilon < 0$).[8]

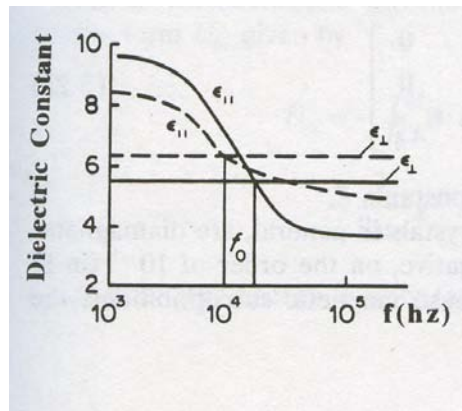


Figura 2.4. Datos de dispersión de las constantes dieléctricas ϵ_{\parallel} y ϵ_{\perp} para la fase isotrópica y nemática del cristal líquido 4-metoxi-4'-n-butilazoxi-benceno

Tensor de Frank-Oseen

Las variaciones espaciales en el campo del director rompen con la alineación establecida por el empaque molecular del cristal líquido, y así incurre en una alteración de energía libre, la minimización de esta determina un equilibrio o dependencia del director \mathbf{n} en la posición z . Si el cambio de la orientación del director es pequeña a lo largo de la molécula (el cambio para las moléculas pequeñas del cristal líquido nemático generalmente cumple con esta condición), entonces el exceso de la densidad de la energía libre, W_d , producida por el gradiente de deformación se puede obtener de la teoría de Frank:

$$2W_d = K_1(\nabla \cdot \mathbf{n})^2 + K_2(\mathbf{n} \cdot \nabla \times \mathbf{n})^2 + K_3(\mathbf{n} \times \nabla \times \mathbf{n})^2 \quad (2.11)$$

(splay)

(twist)

(bend)



Donde $\nabla \cdot \mathbf{n}$ y $\nabla \times \mathbf{n}$ son la divergencia y el rotacional de \mathbf{n} . Las tres contribuciones W_d son asociadas con las tres principales formas de distorsión: apertura, torsión y pandeamiento, las cuales se pueden apreciar en la figura 1.9. Los términos de mayor orden cuadrático en ∇n sólo son requeridos si la distorsión espacial es muy grande. Las constantes de Frank K_1 , K_2 y K_3 son del orden u/a , donde a es una escala de longitud molecular (el volumen de las moléculas dividido por su longitud al cuadrado y u es un parámetro de energía de interacción nemática). Con esto podemos estimar que el valor de K para moléculas pequeñas debería tener una magnitud de 10^{-6} din. Lo cual concuerda con los valores experimentales típicos.)

➤ Reología en los cristales líquidos

Se denomina reología, palabra introducida por Eugen Bingham en 1929, al estudio de la deformación y el flujo de la materia. La real academia española define reología como: estudio de los principios físicos que regulan el movimiento de los fluidos.

Una definición más moderna expresa que la **reología** es la parte de la física que estudia la relación entre el esfuerzo y la deformación en los materiales que son capaces de fluir. Una de las metas más importantes en reología es encontrar ecuaciones constitutivas para modelar el comportamiento de los materiales, dichas ecuaciones son en general de carácter tensorial.

La reología provee las herramientas para entender estos comportamientos tan peculiares. La figura siguiente muestra un fluido sometido a una deformación simple entre dos planos paralelos. El plano inferior es estacionario, mientras que el plano superior se mueve a una velocidad v como consecuencia de una fuerza F aplicada al mismo.

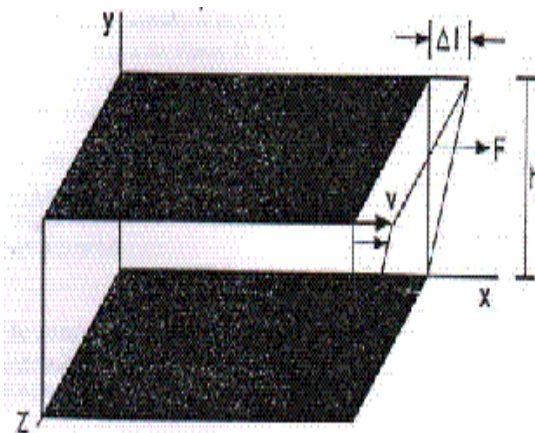


Figura 2.5. Deformación simple de un cuerpo entre dos planos paralelos



El movimiento del plano establece un gradiente de velocidad en el fluido. Esta geometría puede ser usada para definir algunos parámetros reológicos tales como:

Esfuerzo de corte ó cizalla (τ)

Se define como la fuerza por unidad de área necesaria para alcanzar una deformación dada. Las unidades de esta magnitud son Dinás / cm^2

$$\tau = \frac{F \text{ (Fuerza)}}{A \text{ (Área)}} = \frac{\text{DINA}}{\text{cm}^2}$$

Velocidad de Corte ó Cizalla (τv)

Se define como el cambio de velocidad v a través de la distancia h entre dos planos. Las unidades son 1/segundo. La velocidad de corte se incrementa a medida que la velocidad del plano superior aumenta y la distancia entre los dos planos se hace más pequeña.

$$\tau v = \frac{dv}{dh} = \frac{\text{cm/s}}{\text{cm}} = \text{s}^{-1}$$

El fluido entre los planos resiste el movimiento del plano superior, y esta resistencia al flujo se determina por la viscosidad del fluido (η).

Flujo de Poiseuille

La viscosidad de un líquido se mide, generalmente, por el tiempo que un volumen dado de una sustancia tarda en atravesar un tubo de pequeño calibre a una temperatura y presión determinadas.

La unidad absoluta de viscosidad es el Poise (de Poiseuille, médico y físico y uno de los primeros investigadores de este fenómeno). El Poise (P) corresponde a la fuerza que hay que ejercer por unidad de superficie para conseguir que entre dos planos de 1 cm^2 de superficie, separados un cm entre sí, se establezca una diferencia de velocidad de 1cm por segundo.

Ahora bien, la ley de Poiseuille, es la que permite determinar el flujo laminar estacionario de un líquido incompresible y uniformemente viscoso, a través de un tubo cilíndrico de sección circular constante, en el cual se observa un perfil de velocidad similar a una parábola. La ley de Poiseuille posteriormente llevaría el nombre de otro científico (Gotthilf Heinrich Ludwig Hagen) que paralelamente a él, también enunció la misma ecuación. La ecuación de Poiseuille se puede aplicar en



el flujo sanguíneo (vasos capilares y venas), también es posible aplicar la ecuación en el flujo de aire que pasa por los alvéolos pulmonares o el flujo de una medicina que es inyectada a un paciente, a través de una aguja hipodérmica. En nuestro caso será utilizado para observar el comportamiento de un cristal líquido nemático bajo la influencia de una diferencia de presión, lo cual provocará un comportamiento similar al del flujo de Poiseuille.

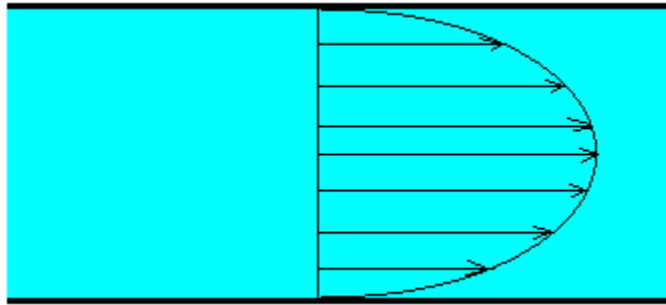


Figura 2.6. Representación grafica del flujo de Poiseuille.

Fluidos Newtonianos y no-Newtonianos

Un fluido newtoniano es un fluido con viscosidad, en el que las tensiones tangenciales de rozamiento son directamente proporcionales al gradiente de velocidades. Un buen número de fluidos comunes se comportan como fluidos newtonianos bajo condiciones normales de presión y temperatura: el aire, el agua, la gasolina y algunos aceites minerales.

Un fluido no newtoniano es aquél cuya viscosidad varía con el gradiente de tensión que se le aplica. Como resultado, un fluido no-newtoniano no tiene un valor de viscosidad definido y constante, a diferencia de un fluido newtoniano.

En el flujo newtoniano la viscosidad es constante, independientemente del esfuerzo de corte al cual se somete el fluido, y en el no newtoniano la viscosidad depende del esfuerzo de corte aplicado.

Viscosidad

La viscosidad se define como la resistencia de un líquido a fluir. Esta resistencia es provocada por las fuerzas de atracción entre las moléculas del líquido. El esfuerzo necesario para hacer fluir el líquido (esfuerzo de desplazamiento) estará en función de esta resistencia. Los fluidos con alta viscosidad ofrecen cierta resistencia a fluir, mientras que los poco viscosos lo hacen con facilidad.

Existen tres tipos de viscosidad: la viscosidad dinámica, la viscosidad cinemática y la viscosidad aparente.



Capítulo 3

Modelo para describir el comportamiento del cristal líquido nemático

➤ **Modelo**

En este capítulo vamos a desarrollar un modelo que describa el comportamiento del cristal líquido nemático 5CB, el cual cuenta con moléculas tipo calamíticas. Éste último estará bajo la influencia simultánea de un campo eléctrico y una diferencia de presión sobre el eje x . Para el desarrollo del modelo ya mencionado, nos basaremos en la teoría de Ericksen, Leslie y Parodi tomando como referencia el siguiente sistema:

Consideraremos que tenemos una capa de cristal líquido nemático con un espesor l , que está confinado entre dos placas paralelas. La celda se encuentra bajo la acción de un campo eléctrico E perpendicular a la misma y un gradiente de presión que da lugar a un flujo de Poiseuille. La celda presentará un anclaje fuerte contando con una alineación híbrida tal como se muestra en la Figura 3.1.

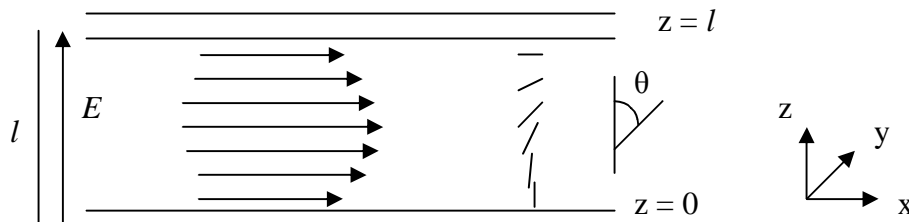


Figura 3.1 Ejemplificación gráfica del sistema

Bajo estas condiciones la configuración del director \mathbf{n} es espacialmente homogénea a lo largo de los ejes x y y , es decir, que la configuración del director no cambia con respecto al eje x y y , solo cambia con respecto al eje z .

$$\mathbf{n} = [\text{sen}\theta, 0, \text{cos}\theta], [x, y, z] \quad (3.1)$$

donde $\theta(z)$ es el ángulo orientacional definido con respecto al eje z , cabe mencionar que las condiciones a la frontera que satisface el ángulo orientacional en las placas de arriba y abajo respectivamente son de 90° y 0° , por lo tanto:

$$\theta(z=l) = \frac{\pi}{2}, \quad (3.2)$$

$$\theta(z=0) = 0. \quad (3.3)$$

Dado que el cambio de la velocidad se da en el plano $x - z$ y a lo largo de la dirección x :



$$v = [v_x(z), 0, 0]. \quad (3.4)$$

Tomando en cuenta lo anterior y sabiendo que las moléculas que se encuentran en las fronteras de la celda no tienen ningún desplazamiento debido al anclaje, la velocidad a lo largo del eje x en las fronteras de arriba y de abajo de la celda, respectivamente, se expresa como:

$$v_x(z=l) = 0 \quad v_x(z=0) = 0. \quad (3.5)$$

Como vimos en el capítulo 2, una manera de describir el flujo de los cristales líquidos es mediante la teoría de Ericksen, Leslie y Parodi (teoría ELP), que describe el flujo de los cristales líquidos mediante el tensor de esfuerzos

$$\sigma_{ij} = \alpha_1 n_i n_j V_{kp} n_k n_p + \alpha_2 n_j N_i + \alpha_3 n_i N_j + \alpha_4 V_{ij} + \alpha_5 n_j V_{ik} n_k + \alpha_6 n_i V_{jk} n_k, \quad (3.6)$$

donde α_2 y α_3 son coeficientes de viscosidad de Leslie,

$$V_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial v_i}{\partial x_j} + \frac{\partial v_j}{\partial x_i} \right), \quad (3.7)$$

es la parte simétrica del tensor de gradiente de velocidad,

$$N_i = \frac{dn}{dt} - \frac{1}{2} \left(\frac{\partial v_i}{\partial x_j} - \frac{\partial v_j}{\partial x_i} \right) n_j, \quad (3.8)$$

es la rotación del director relativa al fluido, en estas ecuaciones se utilizó la notación $x_1 = x$, $x_2 = y$ y $x_3 = z$.

Para encontrar la ecuación de movimiento del director necesitamos considerar los torques que se ejercen sobre las moléculas de cristal líquido en la celda.

Como mencionamos al principio del capítulo, vamos a considerar el torque causado por la interacción de las moléculas de cristal líquido y las placas de la celda. En este trabajo nosotros suponemos un anclaje fuerte en las fronteras de la celda con una alineación híbrida.



A continuación tenemos el torque debido al flujo, el cual inducirá a las moléculas de cristal líquido a orientarse de forma más o menos paralela a las placas de la celda.

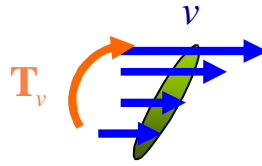


Figura 3.2 Comportamiento de la molécula de cristal líquido nemático, sujeto al flujo de Poiseuille

Considerando que solo 5 de los 6 coeficientes de Leslie son linealmente independientes ya que la ecuación de Parodi establece que:

$$\alpha_2 + \alpha_3 = \alpha_6 - \alpha_5, \quad (3.9)$$

Y tomando en cuenta la teoría ELP, se puede establecer el torque que se ejerce sobre la molécula por influencia del flujo, el cual es determinado por la siguiente ecuación:

$$\mathbf{T} = \mathbf{n} \times \left(\left(\frac{\alpha_3 - \alpha_2}{2} (v) \text{angular} \right) \times \mathbf{n} - (\alpha_6 - \alpha_5) \mathbf{V} \cdot \mathbf{n} \right). \quad (3.10)$$

La ecuación del torque debido al flujo actuando sobre la molécula, puede ser simplificada a la siguiente ecuación:

$$T_{\text{flujo}} = [\alpha_3 \text{sen}^2 \theta - \alpha_2 \text{cos}^2 \theta] \frac{dv}{dz}. \quad (3.11)$$

El siguiente torque que consideraremos será el que se debe al campo eléctrico, este último induce un dipolo eléctrico en la molécula de cristal líquido, lo cual origina que estas se orienten paralelamente al campo eléctrico, este torque puede ser descrito por la siguiente ecuación:

$$T_{\text{electrica}} = \frac{\epsilon_a \epsilon_0}{2} E^2 \text{sen} 2\theta, \quad (3.12)$$

donde ϵ_0 es la permitividad en el vacío, $\epsilon_a = \epsilon_{\parallel} - \epsilon_{\perp}$ es la anisotropía dieléctrica del cristal líquido, $\epsilon_{\parallel} = n_o^2$ es la constante dieléctrica paralela, n_o es el índice de refracción ordinario, $\epsilon_{\perp} = n_e^2$ es la constante dieléctrica perpendicular, n_e es el índice de refracción extraordinario, E es el campo eléctrico.

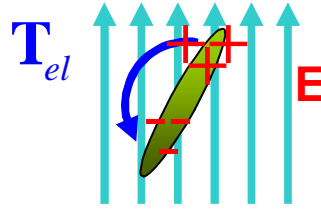


Figura 3.3 Comportamiento de la molécula de cristal líquido nemático, bajo la influencia de un campo eléctrico.

Como lo mencionamos anteriormente, los cristales líquidos tienen ciertas propiedades similares a las de los cristales sólidos. Entre éstas están que poseen elasticidad. La energía elástica del cristal líquido nemático se puede escribir como:

$$Fe = \frac{1}{2} [K_1 (\nabla \cdot \mathbf{n})^2 + K_2 (\mathbf{n} \cdot \nabla \times \mathbf{n})^2 + K_3 (\mathbf{n} \times \nabla \times \mathbf{n})^2], \quad (3.13)$$

Donde K_1 es la constante de deformación “splay” (apertura), K_2 es la constante de deformación “twist” (torsión) y K_3 es la constante de deformación “bend” (pandeamiento)

De esta última ecuación se puede obtener el torque elástico, dando como resultado:

$$T_{elástica} = (K_1 \text{sen}^2 \theta + K_3 \text{cos}^2 \theta) \left(\frac{d^2 \theta}{dz^2} \right) + (K_1 - K_3) \text{sen} \theta \text{cos} \theta \left(\frac{d\theta}{dz} \right)^2. \quad (3.14)$$

El siguiente torque que tomaremos en cuenta es el torque debido a la inercia rotacional y a la fricción viscosa, el cual está descrito por:

$$T_{dinamica} = I \frac{d^2 \theta}{dt^2} + \gamma \frac{d\theta}{dt}, \quad (3.15)$$

donde I es la Inercia rotacional y γ es la fricción viscosa.

En este trabajo vamos a considerar que el director ya alcanzó el estado estacionario, es decir, que su orientación es independiente del tiempo. Por lo tanto, la ecuación que expresa el equilibrio de torques toma la siguiente forma:

$$0 = (K_1 \text{sen}^2 \theta + K_3 \text{cos}^2 \theta) \left(\frac{d^2 \theta}{dz^2} \right) + (K_1 - K_3) \text{sen} \theta \text{cos} \theta \left(\frac{d\theta}{dz} \right)^2 + [\alpha_3 \text{sen}^2 \theta - \alpha_2 \text{cos}^2 \theta] \frac{dv}{dz} - \frac{\epsilon_a \epsilon_0}{2} E^2 \text{sen} 2\theta. \quad (3.16)$$



➤ Método de solución

El modelo presentado en el punto anterior nos describe el comportamiento de un cristal líquido nemático dentro de una celda híbrida bajo la influencia de una diferencia de presión y un campo eléctrico, esto último se representa a través de la ecuación (3.16).

Tomando en cuenta el modelo mencionado anteriormente y considerando que este trabajo se enfoca en el estado estacionario del sistema ya mencionado; el método de solución será encaminado a dar resolución a la ecuación (3.16).

La ecuación (3.16) se puede completar con la ecuación de conservación de momento lineal:

$$\delta \frac{\partial v_i}{\partial t} = \frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_j} + \delta g_i, \quad (3.17)$$

donde el término de la izquierda nos expresa la derivada de la velocidad con respecto al tiempo y en el término de la derecha se expresan las densidades de fuerzas de superficie y de volumen, respectivamente.

El lado izquierdo de la ecuación es cero, ya que nuestro sistema se encuentra en un estado estacionario, por lo tanto no depende del tiempo.

Por otro lado, la única fuerza de volumen que actúa en el eje x se debe al gradiente de presión. Por definición:

$$P_x = \frac{F_x}{A}, \quad (3.18)$$

donde F_x es la fuerza de volumen debida a la presión y A es el área de la sección transversal de la celda.

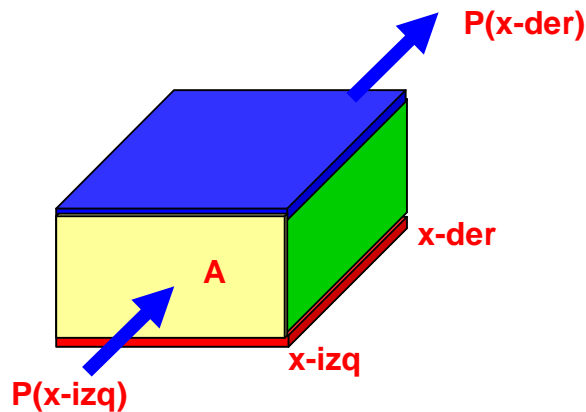


Figura 3.4 Ejemplificación grafica del gradiente de presión en la celda y el área de la sección transversal de la celda



Considerando un elemento de volumen del fluido, la fuerza neta a lo largo del eje x esta dada por la ecuación siguiente:

$$F_{neta} = [P(x_{izq}) - P(x_{der})]A, \quad (3.19)$$

donde x_{izq} y x_{der} son las coordenadas de los extremos del elemento de volumen.

La ecuación (3.19) también puede expresarse como sigue:

$$F_{neta} = \frac{[P(x_{izq}) - P(x_{der})]}{x_{izq} - x_{der}} A(x_{izq} - x_{der}). \quad (3.20)$$

Si llamamos a:

$$\nabla P = \frac{[P(x_{izq}) - P(x_{der})]}{x_{izq} - x_{der}}, \quad (3.21)$$

y como:

$$Vol = A(x_{izq} - x_{der}), \quad (3.22)$$

es el volumen del cristal líquido entonces:

$$F_{neta} = -\nabla P(Vol). \quad (3.23)$$

Si la diferencia de presión es constante a lo largo del eje x , entonces la ecuación (3.23) también puede ser escrita como sigue:

$$F_{neta} = -\frac{dP}{dx}(Vol). \quad (3.24)$$

El signo negativo que aparece en la ecuación anterior, se debe a que al tener un flujo hacia la derecha en nuestra celda, el gradiente de presión tendrá un valor negativo, pero la fuerza mantendrá su valor positivo; mientras que si el flujo es hacia la izquierda el valor del gradiente de presión será positivo, pero la fuerza tendrá un valor negativo.

Puesto que $\delta g_i = \frac{F}{V}$ ya que δg_i es la fuerza sobre el elemento de volumen por unidad de volumen, entonces la ecuación (3.17) se puede escribir como:

$$0 = \frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_j} - \frac{dP}{dx}. \quad (3.25)$$

Para poder evaluar la ecuación (3.25) necesitamos desarrollar la ecuación (3.6), utilizando las ecuaciones (3.1), (3.4) y (3.7) obteniéndose que:



$$V_{11} = V_{12} = V_{22} = V_{21} = V_{33} = V_{32} = V_{23} = 0, \quad (3.26)$$

y

$$V_{13} = V_{31} = \frac{1}{2} \frac{\partial v_1}{\partial x_3}. \quad (3.27)$$

Análogamente, a partir de la ecuación (3.8) obtenemos que:

$$N_1 = -\frac{1}{2} \frac{\partial v_1}{\partial x_3} n_3, \quad (3.28)$$

$$N_2 = 0, \quad (3.29)$$

$$N_3 = \frac{1}{2} \frac{\partial v_1}{\partial x_3} n_1, \quad (3.30)$$

Si sustituimos las ecuaciones (3.26) - (3.30) en la ecuación (3.6), obtenemos:

$$\begin{aligned} \sigma_{1j} = & \alpha_1 n_1 n_j \left[\frac{1}{2} \frac{\partial v_1}{\partial x_3} n_1 n_3 + \frac{1}{2} \frac{\partial v_1}{\partial x_3} n_1 n_3 \right] + \alpha_2 n_j \left(-\frac{1}{2} \frac{\partial v_1}{\partial x_3} n_3 \right) + \\ & \alpha_3 n_1 N_j + \alpha_4 V_{1j} + \alpha_5 n_j n_3 \left(\frac{1}{2} \frac{\partial v_1}{\partial x_3} \right) + \alpha_6 n_i V_{j1} n_1 + \alpha_6 n_1 n_3 V_{j3} \end{aligned} \quad (3.31)$$

en particular:

$$\begin{aligned} \sigma_{13} = & \alpha_1 n_1^2 n_3^2 \frac{\partial v_1}{\partial x_3} - \frac{1}{2} \alpha_2 n_3^2 \frac{\partial v_1}{\partial x_3} + \\ & \frac{1}{2} \alpha_3 n_1^2 \frac{\partial v_1}{\partial x_3} + \frac{1}{2} \alpha_4 \frac{\partial v_1}{\partial x_3} + \frac{1}{2} \alpha_5 n_3^2 \frac{\partial v_1}{\partial x_3} + \frac{1}{2} \alpha_6 n_1^2 \frac{\partial v_1}{\partial x_3} \end{aligned} \quad (3.32)$$

Factorizando $\frac{\partial v_1}{\partial x_3}$ y sustituyendo n_i obtenemos

$$\sigma_{13} = \frac{\partial v_1}{\partial x_3} \left[\alpha_1 \text{sen}^2 \theta \cos^2 \theta - \frac{1}{2} \alpha_2 \cos^2 \theta + \frac{1}{2} \alpha_3 \text{sen}^2 \theta + \frac{1}{2} \alpha_4 + \frac{1}{2} \alpha_5 \cos^2 \theta + \frac{1}{2} \alpha_6 \text{sen}^2 \theta \right] \quad (3.33)$$

Simplificando y utilizando la definición de los coeficientes de Miezowicz definidos anteriormente podemos escribir finalmente:

$$\sigma_{13} = \frac{\partial v_1}{\partial x_3} \eta(\theta), \quad (3.34)$$



donde la viscosidad dependiente de la posición en el cristal líquido es:

$$\eta(\theta) = \alpha_1 \text{sen}^2 \theta \cos^2 \theta + \eta^b \text{sen}^2 \theta + \eta^c \cos^2 \theta. \quad (3.35)$$

Sustituyendo la ecuación (3.34) en (3.25) obtenemos que la ecuación de conservación de momento lineal puede escribirse como:

$$\nabla P \equiv \frac{dP}{dx_1} = \frac{\partial}{\partial x_3} \left[\eta(\theta) \frac{\partial v_1}{\partial x_3} \right], \quad (3.36)$$

Integrando con respecto a x_3 se tiene que:

$$(\nabla P)x_3 - \nabla P(c) = \eta(\theta) \frac{dv_1}{dx_3}, \quad (3.37)$$

donde c es una constante de integración.

Despejando $\frac{dv_1}{dx_3}$ e integrando nuevamente obtenemos:

$$v_1(x_3) = \nabla P \left[\int_0^{x_3} \frac{x'_3 dx'_3}{\eta(\theta(x'_3))} - c \int_0^{x_3} \frac{dx'_3}{\eta(\theta(x'_3))} \right], \quad (3.38)$$

de donde podemos obtener c usando la condición de frontera dada por la ecuación (3.5), resultando:

$$c = - \frac{\int_0^1 \frac{x_3 dx_3}{\eta(\theta(x_3))}}{\int_0^1 \frac{dx_3}{\eta(\theta(x_3))}}. \quad (3.39)$$

De lo anterior, la ecuación de conservación de momento lineal se expresa finalmente como:

$$\frac{dv_x}{dz} = \frac{\nabla P}{\eta(\theta)} (z - c). \quad (3.40)$$

Sustituyendo la ecuación (3.40) en la ecuación (3.16) obtenemos:

$$0 = (\text{sen}^2 \theta + \tau \cos^2 \theta) \left(\frac{d^2 \theta}{d\zeta^2} \right) + (1 - \tau) \text{sen} \theta \cos \theta \left(\frac{d\theta}{d\zeta} \right)^2 + \frac{m}{\eta(\theta)} [\alpha_3 \text{sen}^2 \theta - \alpha_2 \cos^2 \theta] (\zeta - c) - q \text{sen} 2\theta \quad (3.41)$$



Donde definimos las variables normalizadas:

$$\zeta \equiv \frac{z}{l}$$

$$\text{y } \tau = \frac{K_3}{K_1} \text{ además de las variables adimensionales } m = \frac{(\nabla P)l^4}{K_1} \text{ y } q = \frac{\varepsilon_a \varepsilon_0}{2K_1} l^2 E^2$$

La ecuación (3.41) se resuelve numéricamente para obtener la configuración de equilibrio del director. Esto último se logra utilizando el método de disparo (Shooting) el cual se realizó usando el software llamado "Mathematica", en el cual, el programa utiliza un método iterativo, donde se buscan las condiciones iniciales que cumplan con las condiciones a la frontera dentro de un rango especificado. Esto se realizó en un intervalo de campo eléctrico de $q = 0$ a $q = 20$ y un intervalo de flujo de $m = -20$ a $m = 20$; de lo anterior, una vez que el programa encontró las raíces que cumplen con las condiciones a la frontera, podremos saber las condiciones en las que se encuentran las moléculas de cristal líquido en el centro de la celda.



Capítulo 4 Resultados

En este capítulo abordaremos los resultados obtenidos de los cálculos numéricos realizados para el cristal líquido 4'-n-fenil-4-cianobifenil (5CB). Tomando en consideración que los coeficientes de Leslie para este cristal líquido nemático a la temperatura de 25°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 y $\alpha_6 = -0.0208$ Pa-s. Así como $K_1 = 1.2 \times 10^{-11}$ N y $K_3 = 1.5792 \times 10^{-11}$

Las cantidades a evaluar son: La orientación del director, el perfil de velocidades, la viscosidad y las fuerzas de arrastre sobre las placas para distintos valores del gradiente de presión y campo eléctrico.

Antes de comenzar con el análisis de nuestros resultados es pertinente mencionar que cuando tenemos una m positiva, el flujo es hacia la izquierda y cuando la m es negativa el flujo es hacia la derecha, esto último es resaltado para facilitar la interpretación de las figuras. En la figura 4.1 se muestra el valor del ángulo que forma la molécula de cristal líquido con el eje z .

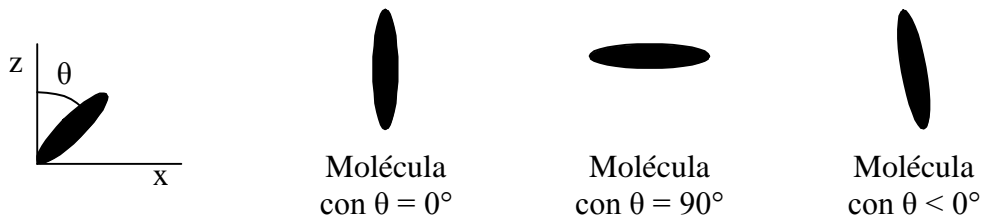


Figura 4.1 Valor del ángulo dependiendo de la inclinación de la molécula.

Así como la figura 4.1 nos ayudará a entender mejor las figuras de los resultados obtenidos, la figura 4.2 nos permitirá entender de mejor forma el comportamiento de las moléculas de cristal líquido en la celda, tanto bajo la influencia de un flujo hacia la derecha, un flujo hacia la izquierda, campo eléctrico o la acción simultánea de estas.



Figura 4.2 Configuración inicial de las partículas de cristal líquido, debido a la alineación híbrida.



➤ Director

En primer lugar se presentarán los resultados del ángulo orientacional $\theta(z)$ del vector director del cristal líquido nemático 5CB. En las figuras correspondientes a esta sección de resultados se grafica el ángulo orientacional θ vs. ζ , lo cual se obtiene a partir de la ecuación (3.41) para varios valores de q (campo eléctrico) y m (flujo).

$$0 = (\sin^2 \theta + \tau \cos^2 \theta) \left(\frac{d^2 \theta}{d\zeta^2} \right) + (1 - \tau) \sin \theta \cos \theta \left(\frac{d\theta}{d\zeta} \right)^2 + \frac{m}{\eta(\theta)} [\alpha_3 \sin^2 \theta - \alpha_2 \cos^2 \theta] (\zeta - c) - q \sin 2\theta \quad (3.41)$$

Como se puede observar en la Figura 4.3a, se graficó θ vs. ζ , para valores de $m = -20$ a $m = 20$ en ausencia de campo eléctrico. En esta figura salta a la vista una característica muy importante, que nos permite tener cierta confiabilidad en los resultados obtenidos, puesto que al no tener valores de flujo ni de campo eléctrico, la orientación del ángulo a través de la celda tiene un comportamiento casi lineal tal como se expresa en la bibliografía consultada [13]. Ahora bien, al aplicar un flujo hacia la derecha (m negativo) en ausencia de campo eléctrico, las moléculas del cristal líquido tienden a colocarse horizontalmente, es decir, que las moléculas de cristal líquido incrementan el ángulo orientacional por el torque debido al flujo, el cual puede apreciarse de manera más clara en la figura 3.2 del capítulo anterior.

Tomando en consideración que entre mayor es el flujo, mayor es el ángulo orientacional que muestran las moléculas de cristal líquido, cuando existe un flujo hacia la izquierda (m positivo) en ausencia de campo eléctrico, las moléculas de cristal líquido tiene un comportamiento totalmente diferente, ya que las moléculas tienden a colocarse mas verticalmente. Esto último se debe a la posición de la molécula de cristal líquido dentro de la celda, ya que esta última origina que el torque debido al flujo oriente a la molécula de cristal líquido de forma aproximadamente vertical. Esto último puede apreciarse más claramente observando la figura 4.2 que se muestra al inicio de este capítulo.

Es pertinente mencionar que en la figura 4.3a se puede apreciar que cuando tenemos un valor de $m = 20$ existe una pequeña región de la celda en la que las moléculas adoptan ángulos negativos, es decir, que estas moléculas que originalmente estaban inclinadas hacia la derecha, pasaron la vertical y comenzaron a inclinarse a la izquierda debido a la fuerza del flujo, aspecto que tendrá mayor consideración en los resultados en los cuales la molécula sea influenciada por el flujo y el campo eléctrico simultáneamente. En la figura 4.1 se puede apreciar la alineación de una molécula que cuenta con ángulos menores a 0.

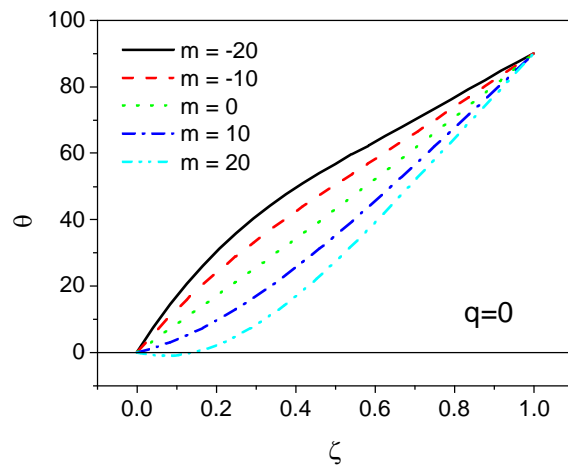


Figura 4.3a Director para $q = 0$ y m : (-20, 20)

Una vez observado el comportamiento de las moléculas de cristal líquido solo bajo la influencia del flujo, nos permitirá comprender de mejor forma la conducta de las moléculas en la celda bajo la influencia simultánea del campo eléctrico y la diferencia de presión, aspectos que encontramos en la figura 4.3b en la cual se graficó θ vs. ζ , para valores de $m = -20$ a $m = 20$ con $q = 20$. Se puede observar que las moléculas tienden a orientarse casi verticalmente debido a la fuerza que ejerce el campo eléctrico sobre ellas. Esto origina que las moléculas tiendan a estar casi verticales sobre la mayor parte de la celda, cambiando solo en la parte superior de la celda debido al anclaje fuerte con el que cuenta la placa superior, la cual orienta las moléculas hacia los 90° , es decir, de forma horizontal.

En la figura 4.3b también se aprecia que existe una región de la celda en la cual las moléculas de cristal líquido pasaron la vertical; pero en adición a esto, la región que pasa la vertical de esta gráfica, es ampliamente mayor, esto último se debe a la influencia simultánea del campo eléctrico y el flujo hacia la izquierda, es decir, las moléculas de cristal líquido ya se encuentran casi verticales (muy cercanas a los 0°) al estar influenciadas por el campo eléctrico, y si además agregamos la influencia de la diferencia de presión, las moléculas presentarían una alineación que pase la vertical.

Otro aspecto a considerar de esta figura, es que la influencia que ejerce el flujo hacia la izquierda sobre las moléculas de cristal líquido es más perceptible en la parte inferior de la celda, esto último se debe posiblemente a la alineación híbrida con la que cuenta la celda, puesto que la placa inferior de la celda cuenta con un anclaje fuerte, el cual induce a las moléculas de cristal líquido a permanecer verticales, lo cual facilita la influencia del campo eléctrico y la diferencia de presión con m positivo. Sin embargo, en esta figura se puede apreciar que la mayor parte



de las moléculas en la celda no sobrepasan la vertical, solamente sobrepasan la vertical las moléculas afectadas por el campo eléctrico y una diferencia de presión hacia la izquierda relativamente alta.

También es pertinente mencionar que existe un punto en esta grafica en el cual no importa el valor del flujo, es decir, el ángulo orientacional de las moléculas de cristal líquido es el mismo. Este fenómeno se da aproximadamente en $\zeta = 0.66$ teniendo un valor de $\theta \approx 13$. Este fenómeno es de gran importancia ya que puede permitirnos alcanzar cierto comportamiento utilizando los valores de m y q más adecuados.

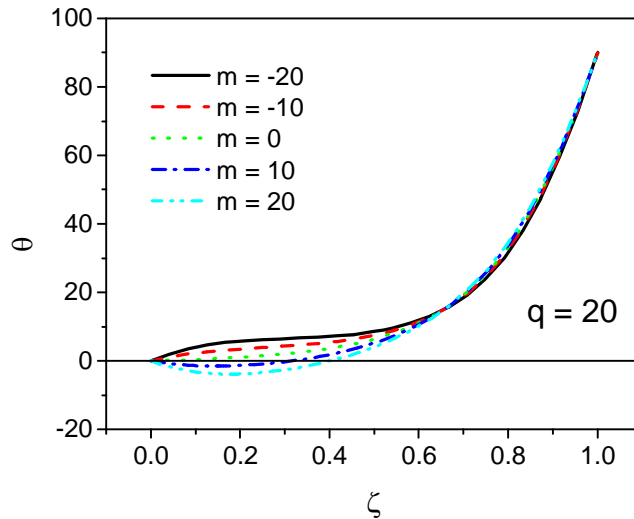


Figura 4.3b Director para $q = 20$ y $m: (-20, 20)$

Ahora bien, con el fin de continuar con el análisis del comportamiento de las moléculas de cristal líquido en la celda, en la Figura 4.4a se graficó θ vs. ζ , para valores de $q = 0$ a $q = 20$ con $m = 0$. Esta figura guarda un comportamiento similar a la Figura 4.3b, puesto que en éstas se puede apreciar que entre mayor sea el campo eléctrico aplicado, menor será el ángulo orientacional que presentan las moléculas de cristal líquido.

Tal como en las figuras anteriores, en la Figura 4.4b se graficó θ vs. ζ , pero para valores de $q = 0$ a $q = 20$ con $m = -20$, en esta figura se puede apreciar que un flujo grande hacia la derecha ($m = -20$) tiende a orientar las moléculas en forma horizontal; sin embargo, en esta grafica también se puede observar que entre más aumenta el campo eléctrico, las moléculas tienden a orientarse más verticalmente, tomando en cuenta que, entre mayor es el campo, las moléculas presentan un ángulo más pequeño. Los dos puntos anteriores, originan una competencia entre las dos influencias que se ejercen sobre las moléculas de cristal líquido, lo cual se ve reflejado en los resultados graficados, puesto que las líneas que representan el ángulo orientacional de las moléculas de cristal líquido en la figura presentan una oscilación mayor, tanto en la parte superior de la figura donde el campo eléctrico



es menor y la diferencia de presión por supuesto es hacia la derecha, como en la parte inferior de la figura donde el campo eléctrico es mayor.

Para finalizar la parte de los resultados concerniente al director, en la Figura 4.4c se grafico θ vs. ζ , para valores de $q = 0$ a $q = 20$ con $m = 20$. En los resultados obtenidos se puede apreciar que existe una región en la celda, en la cual los ángulos orientacionales de las moléculas presentan valores negativos, lo cual se debe a la influencia simultánea del flujo hacia la izquierda y al aumento en el campo eléctrico, tal como se presentó en la gráfica 4.3a y 4.3b. En esta gráfica también es importante tomar en cuenta que, entre mayor es el campo eléctrico, menor es el ángulo orientacional de las moléculas de cristal líquido en la celda, al grado que, gracias la influencia del campo eléctrico y la influencia de la diferencia de presión, las moléculas de cristal líquido son capaces de sobrepasar la vertical y presentar ángulos negativos.

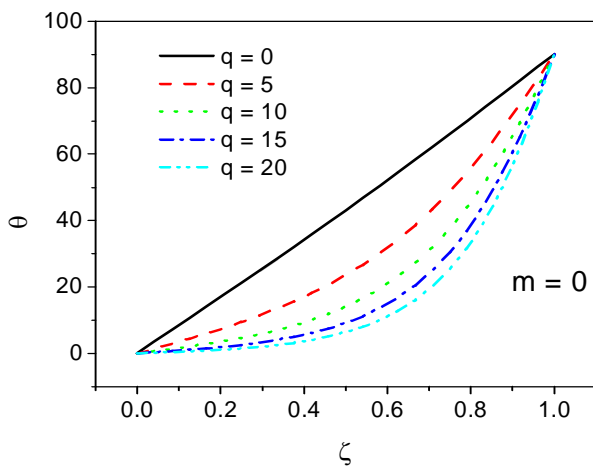


Figura 4.4a Director para $m = 0$ y $q: (0, 20)$

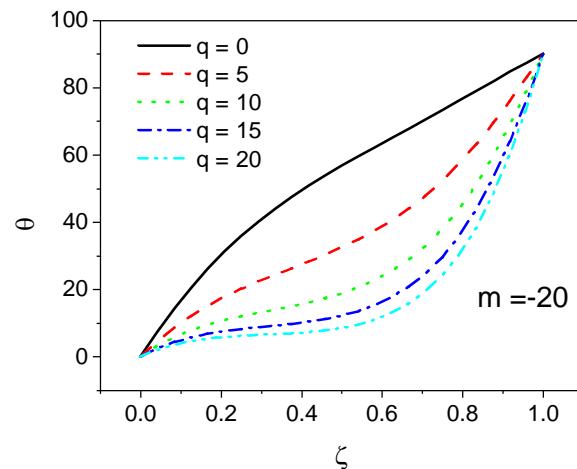


Figura 4.4b Director para $m = -20$ y $q: (0, 20)$

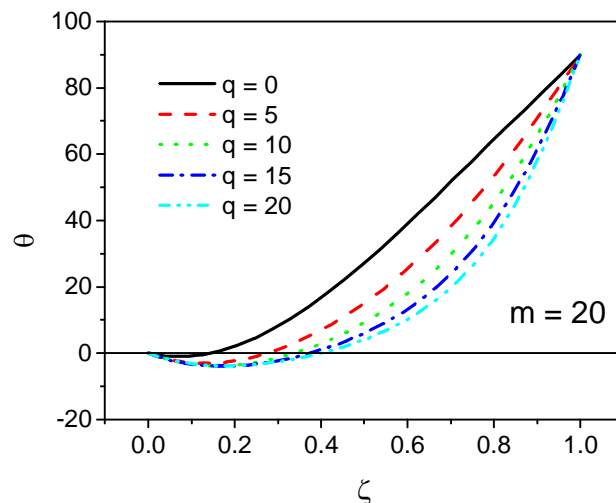


Figura 4.4c Director para $m = 20$ y $q: (0, 20)$



➤ Perfil de velocidad

Para obtener el perfil de velocidad del cristal líquido nemático, integraremos la ecuación de velocidad, la cual se describe en la ecuación (3.40). Es importante mencionar que el término adicional que aparece en esta ecuación, con respecto a la del capítulo anterior se debe a la normalización de la misma:

$$\frac{dv_x}{d\zeta} = \frac{(\nabla P)l^2}{\eta(\theta)} (\zeta - c). \quad (3.40)$$

Integrando la ecuación (3.40) obtenemos lo siguiente:

$$V_x(\zeta) = l^2 \nabla P \int_0^\zeta \frac{\zeta - c(q, m)}{\eta(\theta(\zeta))} d\zeta, \quad (4.1)$$

Sabiendo que m se define como:

$$m = \frac{(\nabla P)l^4}{K_1}, \quad (4.2)$$

entonces podemos escribir:

$$(\nabla P)l^2 = \frac{K_1 m}{l^2}, \quad (4.3)$$

por lo cual, la ecuación (4.1) se puede expresar como:

$$V_x(\zeta) = \frac{K_1 m}{l^2} \int_0^\zeta \frac{\zeta - c(q, m)}{\eta(\theta(\zeta))} d\zeta. \quad (4.4)$$

Ahora bien si definimos una velocidad adimensional como:

$$\tilde{V} = \frac{Vl^2}{K_1}, \quad (4.5)$$

entonces la ecuación (4.4) se transforma en:

$$\tilde{V}_x(\zeta) = m \int_0^\zeta \frac{\zeta - c(q, m)}{\eta(\theta(\zeta))} d\zeta. \quad (4.6)$$



La expresión anterior nos permite obtener el perfil de velocidad del cristal líquido nemático 5CB dentro de la celda. En las figuras correspondientes a esta sección de resultados se grafica el perfil de velocidad v vs. ζ .

En la Figura 4.5a se graficó v vs. ζ , para valores de $m = -20$ a $m = 20$ en ausencia de campo eléctrico. La figura 4.5a nos permite apreciar claramente que el perfil de velocidades es muy similar al perfil del flujo de Poiseuille, el cual es parabólico; sin embargo, en nuestra figura la curvatura de las líneas se inclina más hacia el lado derecho, o mejor dicho, a la parte superior de la celda, esto es debido a la configuración inicial de las moléculas, alineación que puede ser apreciada en la figura 4.2. La alineación híbrida de las moléculas de cristal líquido origina que la velocidad de estas últimas, en la parte superior de la celda sea mayor, ya que se encuentran orientadas casi horizontales debido al anclaje fuerte inducido por la placa superior, lo que permite una menor resistencia al flujo y por lo tanto un perfil de velocidad mayor. Por el contrario en la parte inferior de la celda las moléculas de cristal líquido se encuentran orientadas casi verticalmente, debido nuevamente al anclaje fuerte en la placa inferior de la celda, lo cual origina una mayor resistencia al flujo y por lo tanto un perfil de velocidad menor.

Por otro lado, una característica a resaltar en esta figura, es la influencia que ejerce la alineación de las moléculas de cristal líquido en la celda, ya que no hay simetría entre los perfiles de velocidad con m positiva y los perfiles de velocidad con m negativa. Pues debido a la alineación inicial de las moléculas, los resultados obtenidos presentan una asimetría claramente perceptible mostrando velocidades más grandes con flujos hacia la derecha y velocidades más pequeñas cuando el flujo es hacia la izquierda.

Continuando con el análisis del perfil de velocidad en la celda en la Figura 4.5b se graficó v vs. ζ , para valores de $m = -20$ a $m = 20$ con $q = 20$. En esta figura se puede apreciar un comportamiento similar al de la Figura 4.5a, puesto que esta también guarda un perfil similar a un flujo de Poiseuille, pero igualmente con una inclinación de la curvatura del perfil de velocidad hacia la parte superior de la celda. Sin embargo, ésta presenta un comportamiento un poco más simétrico, sin ser por supuesto totalmente simétrico. Esto último es debido a dos aspectos principales, el primero es el campo eléctrico aplicado sobre la celda, ya que este orienta las moléculas de cristal líquido de forma vertical y el segundo es la alineación híbrida de las moléculas de cristal líquido en la celda. La combinación de estos dos aspectos permite una configuración de las moléculas en la celda muy similar a la presentada en la Figura 4.6. Como se puede apreciar, la posición vertical de las moléculas predomina en gran parte de la celda, es decir, que el campo eléctrico genera una mayor influencia sobre las moléculas que la diferencia de presión, aunque cabe mencionar que a flujos relativamente grandes hacia la derecha la competencia entre la diferencia de presión y el campo eléctrico es mayor, por lo cual, la simetría entre el flujo hacia la derecha y el flujo hacia la izquierda es mayor que en la figura 4.5a.

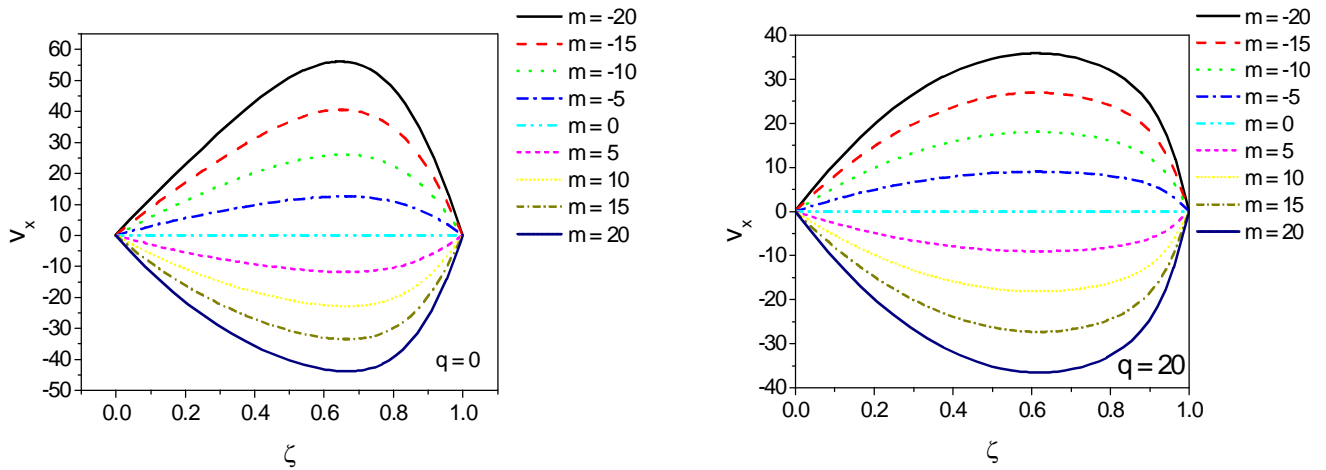


Figura 4.5a Perfil de vel. para $q = 0$ y $m: (-20, 20)$

Figura 4.5b Perfil de vel. para $q = 20$ y $m: (-20, 20)$

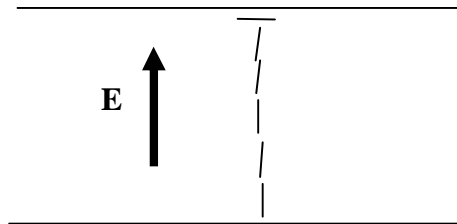


Figura 4.6 Configuración con campo eléctrico de las partículas de cristal líquido.

Con el fin de realizar un análisis más completo del perfil de velocidad de las moléculas de cristal líquido en la celda, en la Figura 4.7a se graficó v vs. ζ , para valores de $q = 0$ a $q = 20$ con $m = -20$. En esta figura se puede apreciar un claro decremento en la velocidad de las moléculas de cristal líquido al aumentar el campo eléctrico, es decir, a mayor campo eléctrico las moléculas tienden a ponerse más verticales, por lo tanto, las partículas oponen más resistencia y fluyen con menor velocidad. La curvatura del perfil de velocidad tiende a inclinarse hacia la parte superior de la celda, esto como ya se había mencionado anteriormente se debe a la alineación híbrida. Es pertinente mencionar que al graficar los resultados con los valores de flujo y campo eléctrico ya mencionados, la figura presenta una característica a considerar, el perfil de velocidad en la celda presentará un límite, en el cual, no importa cuanto aumentemos el campo eléctrico en la celda, la velocidad de las moléculas no bajará más, sólo se contará con un aumento en la velocidad a campos eléctricos grandes si se aumenta la diferencia de presión.

Por último como se puede apreciar en la Figura 4.7b graficamos v vs. ζ , para valores de $q = 0$ a $q = 20$ con $m = 20$. Ocurre algo similar a lo que pasa en la figura



anterior, sólo que en esta figura debido al flujo hacia la izquierda (m positivo), las moléculas tienen velocidades negativas. Ahora bien, tal como ocurrió en la figura 4.7a, el perfil de velocidad que presentan las moléculas de cristal líquido en la celda tendrá un límite, es decir, la velocidad de las moléculas de cristal líquido no será menor, sin importar cuanto más aumentemos el campo eléctrico.

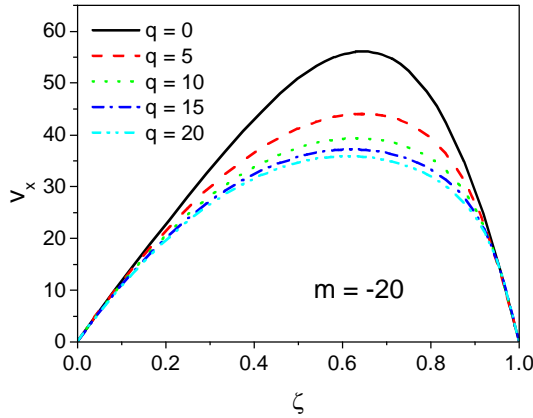


Figura 4.7a Perfil de vel. Para $m = -20$ y $q: (0, 20)$

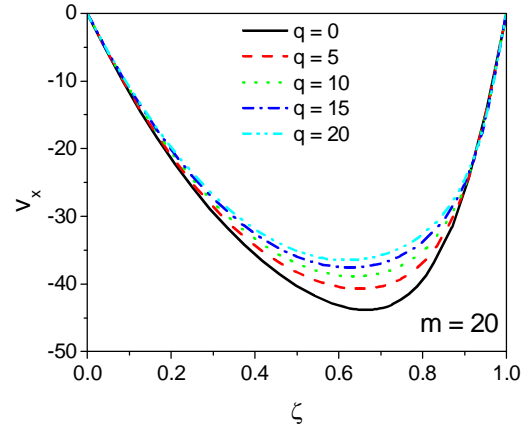


Figura 4.7b Perfil de vel. para $m = 20$ y $q: (0, 20)$

➤ Velocidad promedio del fluido

Para obtener la velocidad promedio del cristal líquido en la celda realizaremos la siguiente integración:

$$\langle \bar{V}_x(q, m) \rangle = \int_0^1 V_x(\zeta; q, m) d\zeta \quad (4.7)$$

De la ecuación anterior obtuvimos los resultados de la velocidad promedio del cristal líquido nemático 5CB en la celda.

Con el fin de realizar el análisis de la velocidad promedio del fluido en la Figura 4.8a se graficó v vs. m , para valores de $q = 0$ a $q = 20$. Podemos apreciar que para $m > 0$, es decir, para flujo hacia la izquierda, tenemos valores de velocidad promedio negativos. Así como para $m < 0$, es decir, para flujo hacia la derecha, tenemos valores de velocidad promedio positivos. Ahora bien, como se puede apreciar en esta figura la alineación híbrida de la celda, origina nuevamente una asimetría entre los resultados con flujo hacia la derecha y los resultados con flujo hacia la izquierda. Nótese que en la región del flujo hacia la izquierda, las líneas que representan el comportamiento de las moléculas de cristal líquido nemático en la celda tienen una mayor similitud entre sí, a diferentes magnitudes de campo eléctrico; mientras que en las líneas que representan el comportamiento de las moléculas de cristal líquido bajo la influencia de una diferencia de presión hacia la derecha muestran una similitud claramente menor.



Un aspecto importante a considerar en la figura 4.8a, es que, con diferencias de presión menores a cero, al aumentar la magnitud del campo eléctrico, las moléculas de cristal líquido tienden a perder velocidad, ya que tienden a alinearse verticalmente.

Ahora bien, graficando v vs. m como se realizó en Figura 4.8b para valores de $m = -20$ a $m = 20$, se puede apreciar que entre mayor sea el valor de $|m|$ (dígase m negativo o m positivo), mayor será la rapidez del flujo en la celda, notando también que cuando tenemos flujo hacia la izquierda el comportamiento de las líneas de nuestra figura es mas lineal que cuando tenemos el flujo hacia la derecha. Esto se debe a que con $m > 0$ las moléculas tienden a orientarse verticalmente y el campo eléctrico las ayuda a mantener esta tendencia, por lo cual, el comportamiento es mas lineal. También se puede apreciar que con $m < 0$, es decir, con un flujo hacia la derecha, las moléculas tienden a orientarse horizontalmente, por lo tanto, las moléculas oponen menos resistencia y la velocidad es mayor, así como también se puede observar como la velocidad disminuye a medida que aumenta el campo eléctrico, esto último por la influencia del campo eléctrico a alinear las moléculas de cristal líquido verticalmente, lo que conlleva a una menor velocidad. En esta grafica tambien se nota una asimetría entre el flujo hacia la izquierda y el flujo hacia la derecha.

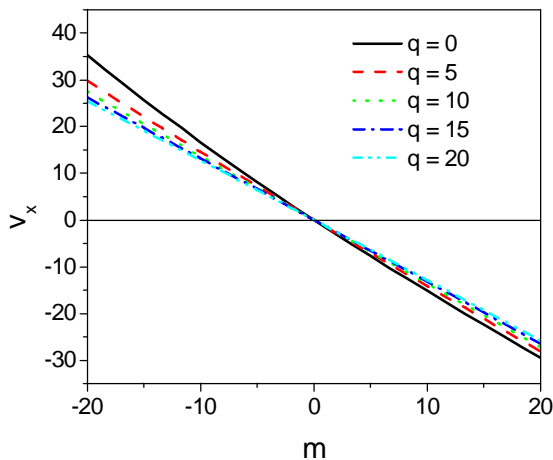


Figura 4.8a Vel. promedio para q: (0, 20)

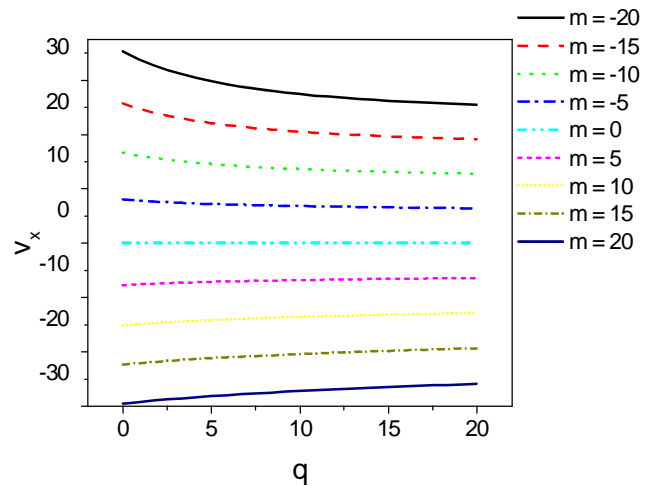


Figura 4.8b Vel. promedio para m: (-20, 20)



➤ Viscosidad local

Con el fin de obtener la viscosidad local del cristal líquido graficamos la ecuación (3.35) para diferentes valores de q y m . En esta sección se grafica η vs. ζ .

$$\eta(\theta) = \alpha_1 \text{sen}^2 \theta \cos^2 \theta + \eta^b \text{sen}^2 \theta + \eta^c \cos^2 \theta \quad (3.35)$$

Para dar inicio a esta sección en la Figura 4.9a se graficó η vs. ζ , para valores de $m = -20$ a $m = 20$, en ausencia de campo eléctrico. En esta figura podemos observar que para $m < 0$ la viscosidad disminuye, esto se debe a que para estos valores de m las moléculas se orientan horizontalmente, por lo tanto, oponen menos resistencia y fluyen más rápido, lo que origina que su viscosidad sea menor. Por el contrario, para m positivas las moléculas se orientan verticalmente, por lo tanto, oponen más resistencia y fluyen más lento, lo que origina que su viscosidad sea mayor. También es importante mencionar que en esta gráfica, debido a la alineación híbrida, la viscosidad es mucho mayor en la parte inferior de la celda que en la parte superior, independientemente del valor de la diferencia de presión que se aplique al cristal líquido.

Es digno de resaltarse que la gráfica cumple con la condición a la frontera de $\eta_c = .1052$ Pa-s en la placa superior de la celda y con la condición a la frontera de $\eta_b = .0204$ Pa-s en la placa inferior de la celda, lo cual se debe a la orientación horizontal de la molécula de cristal líquido en la placa superior de la celda y la orientación vertical en la placa inferior.

Ahora bien, en la Figura 4.9b se graficó η vs. ζ , para valores de $m = -20$ a $m = 20$ con $q = 20$. Se puede observar que las moléculas se comportan de manera similar para cualquier valor de m , esto se debe al campo eléctrico, ya que este último origina que las moléculas tengan una orientación casi vertical, como se puede observar en la figura 4.5, exceptuando claro esta, la frontera de la placa superior de la celda. Es importante mencionar que por lo dicho anteriormente, existe un punto en esta grafica en el cual no importa el valor de m , la viscosidad del cristal líquido es la misma, este fenómeno se da aproximadamente a un valor de $\zeta \approx 0.66$ donde $\eta \approx 0.10$. En esta gráfica, como en la anterior, se puede observar la gran importancia que tiene la alineación de las moléculas en la celda, y como esta puede influir de manera muy importante en el comportamiento de las moléculas de cristal líquido, bajo la influencia particular o simultánea de una diferencia de presión y un campo eléctrico.

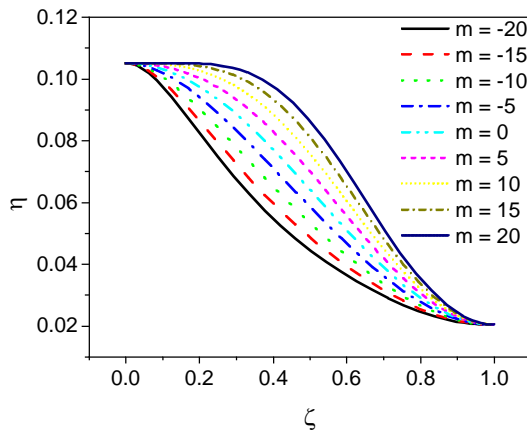


Figura 4.9a Viscosidad local para $q = 0$ y $m: (-20, 20)$.

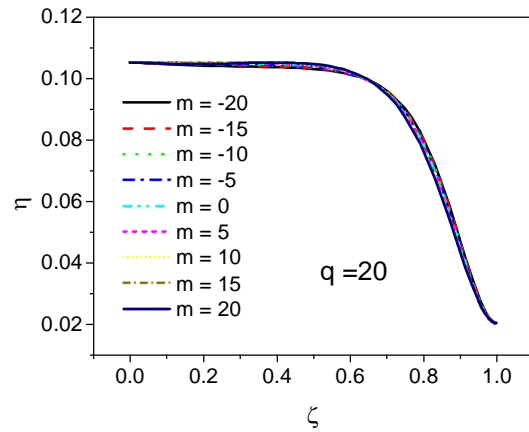


Figura 4.9b Viscosidad local para $q = 20$ y $m: (-20, 20)$.

En la Figura 4.10a se graficó η vs. ζ , para valores de $q = 0$ a $q = 20$ con $m = -20$. Se puede apreciar que entre mayor sea el campo eléctrico, mayor será la viscosidad, esto se debe a que entre mayor sea el campo, las moléculas tenderán a colocarse cada vez más verticales, por lo que opondrán más resistencia al flujo y tendrán una viscosidad mayor. Tal como ocurrió en las graficas anteriores, la grafica cumple con las viscosidades esperadas en las fronteras de la celda y varía notablemente de la parte superior de la celda a la parte inferior de la celda. Cabe mencionar que estas últimas figuras referentes a la viscosidad del cristal líquido que hemos analizado, nos permiten darnos cuenta que van existir valores límite de campo eléctrico y diferencia de presión, es decir, que no importará cuanto más aumentemos el valor de estas influencias externas, la viscosidad no aumentará o disminuirá según sea el caso.

Ahora bien, como se puede apreciar en la Figura 4.10b se graficó η vs. ζ , para valores de $q = 0$ a $q = 20$ con $m = 20$. Donde se observa un comportamiento similar al ocurrido en la figura anterior.

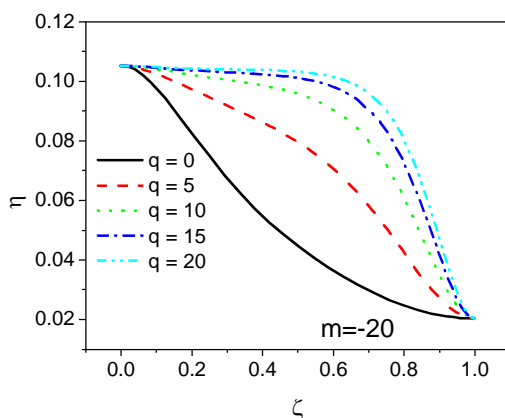


Figura 4.10a Viscosidad local para $m = -20$ y $q: (0, 20)$

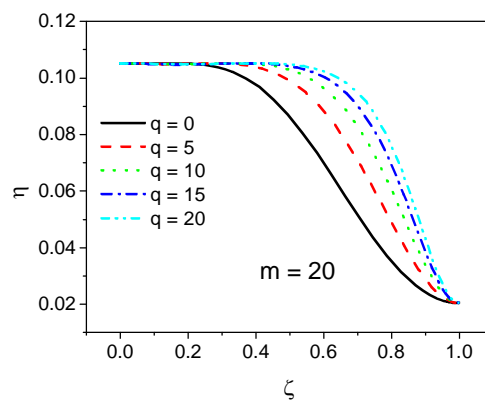


Figura 4.10b Viscosidad local para $m = 20$ y $q: (0, 20)$



➤ Viscosidad aparente

Con el fin de obtener la viscosidad aparente del cristal líquido realizaremos la siguiente integración:

$$\langle \eta(q, m) \rangle = \int_0^1 \eta[\theta(\zeta); q, m] d\zeta \quad (4.8)$$

Con el fin de analizar la viscosidad aparente del cristal líquido en la celda en la Figura 4.11a se graficó η vs. q para valores de $m = -20$ a $m = 20$. En esta figura se puede apreciar, que entre más positivo sea el valor de m , la viscosidad será más grande. En esta figura también se puede apreciar que al aumentar el campo eléctrico la viscosidad aumenta. Este comportamiento se conoce como efecto electro-reológico. Otro aspecto a resaltar en esta figura, es que en presencia de un campo eléctrico grande las moléculas tienden a tener el mismo valor en su viscosidad aparente, sin importar el valor del flujo, esto último es por que a grandes valores de campo eléctrico, las moléculas de cristal líquido mantienen una posición vertical, por lo cual el flujo no ejerce mucha influencia sobre estas últimas.

Ahora bien con el fin de realizar un análisis mas completo de la viscosidad aparente, en la Figura 4.11b se grafico η vs. m para valores de $q = 0$ a $q = 20$. Por lo que en la figura 4.11b podemos notar que, entre mayor sea el campo eléctrico la viscosidad será más grande, además de que entre mayor sea el campo eléctrico, su viscosidad tenderá a ser más semejante a diferentes valores de flujo. Sin embargo, en esta figura se puede observar un fenómeno muy interesante, ya que con una diferencia de presión hacia la izquierda entre mayor sea la magnitud del flujo, mayor será la viscosidad presentada por el cristal líquido, mientras que con una diferencia de presión hacia la derecha entre mayor sea el flujo, menor será la viscosidad presentada por el cristal líquido. Es decir, que en un caso se presenta el fenómeno de “shear thinning” y en el otro el de “shear thickening”.

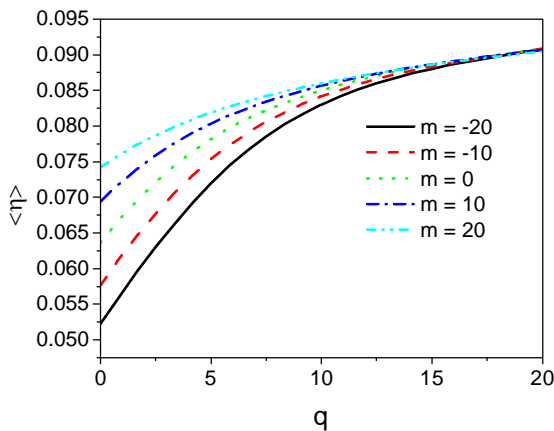


Figura 4.11a Viscosidad aparente para $m: (-20, 20)$

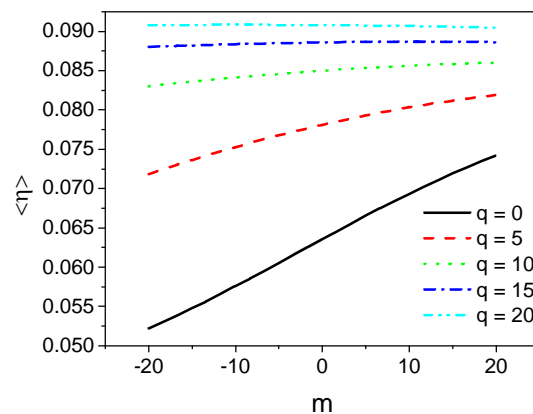


Figura 4.11b Viscosidad aparente para $q: (0, 20)$



➤ **Fuerzas de arrastre**

Para poder obtener los valores de la fuerza de arrastre que ejerce el cristal líquido sobre las placas de la celda, partiremos de la ecuación de velocidad (3.40)

$$\frac{dv_x}{d\zeta} = \frac{(\nabla P)l^2}{\eta(\theta)}(\zeta - c) . \quad (3.40)$$

Tomando en consideración la ecuación (4.3), la ecuación (3.40) puede expresarse como sigue:

$$\frac{\partial V_x}{\partial \zeta} = \frac{K_1 m}{l^2} \int_0^\zeta \frac{\zeta - c(q, m)}{\eta(\theta(\zeta))} . \quad (4.17)$$

Evaluando la ecuación (4.17) en la placa de arriba obtenemos:

$$\left. \frac{\partial V_x}{\partial \zeta} \right|_{\zeta=1} = \frac{K_1 m (1 - c)}{l^2 \eta^b} , \quad (4.18)$$

mientras que para la placa de abajo obtenemos:

$$\left. \frac{\partial V_x}{\partial \zeta} \right|_{\zeta=0} = \frac{K_1 m (-c)}{l^2 \eta^c} . \quad (4.19)$$

Ahora bien, de la ecuación (3.32) obtenemos la siguiente ecuación para el esfuerzo en la placa de arriba

$$\sigma_{13} \Big|_{\zeta=1} = \frac{K_1 m (1 - c)}{l^2} \frac{1}{\eta^b} \eta^b . \quad (4.20)$$

Igualmente, para la placa abajo:

$$\sigma_{13} \Big|_{\zeta=0} = \frac{K_1 m (-c)}{l^2} \frac{1}{\eta^c} \eta^c , \quad (4.21)$$



que son precisamente las fuerzas de arrastre:

$$Dup = \sigma_{13}|_{\zeta=1} = \frac{K_1 m}{l^2} (1-c) \quad (4.22)$$

y

$$Dlow = \sigma_{13}|_{\zeta=0} = \frac{K_1 m}{l^2} (-c); \quad (4.23)$$

que se pueden escribir en forma normalizada como:

$$\tilde{Dup} = Dup \frac{l^2}{K_1} = m(1-c) \quad (4.24)$$

y

$$\tilde{Dlow} = Dlow \frac{l^2}{K_1} = m(-c) . \quad (4.25)$$

De lo anterior, en la Figura 4.12a se graficaron las *fuerzas de arrastre en la placa superior* vs. q para valores de $m = -20$ a $m = 20$. Donde se puede apreciar que entre más grande sea el flujo (dígase hacia la izquierda o hacia la derecha), mayor será la fuerza que ejercerá la placa superior para mantener su estado. Un aspecto importante a mencionar en esta figura es que, para $m < 0$, la placa ejercerá una fuerza de arrastre con valor negativo, ya que el flujo es hacia la derecha.

Otro aspecto importante a considerar, es que entre mayor sea el campo eléctrico aplicado a las moléculas de cristal líquido, mayor será la fuerza de arrastre que emplearan las placas para conservar su estado; sin embargo, como nos podemos dar cuenta en la figura 4.12a, el aumento de las fuerzas de arrastre por influencia del campo eléctrico, si es perceptible, pero no es muy grande, lo cual también puede apreciarse en la Figura 4.12b, donde se graficaron las *fuerzas de arrastre en la placa superior* vs. m para valores de $q = 0$ a $q = 20$. Nótese que en esta figura también se puede apreciar la asimetría entre los flujos, debida a la alineación inicial, tal como se presentó en gráficas anteriores.

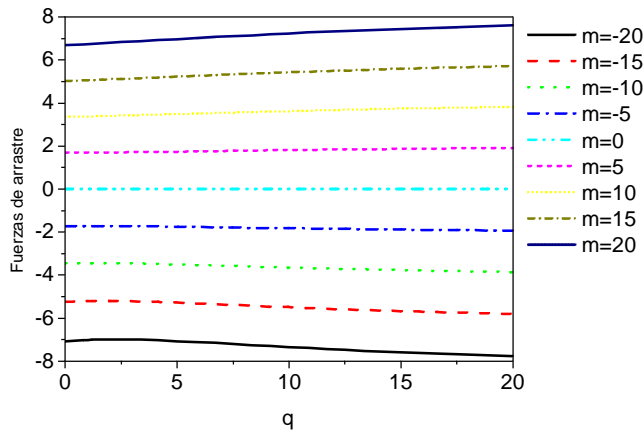


Figura 4.12a. \tilde{D}_{up} para m : (-20, 20)

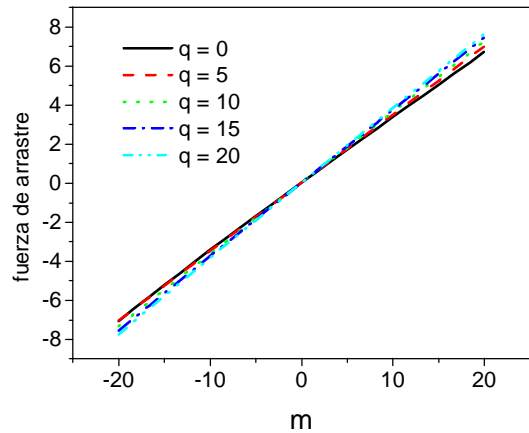


Figura 4.12b. \tilde{D}_{up} para q : (0, 20)

Como se puede apreciar en la Figura 4.13a, donde se graficaron las *fuerzas de arrastre en la placa inferior* vs. q para valores de $m = -20$ a $m = 20$, y en la Figura 4.13b, donde se graficaron las *fuerzas de arrastre en la placa inferior* vs. m para valores de $q = 0$ a $q = 20$, su comportamiento es muy similar al de las figuras 4.12a y 4.12b.

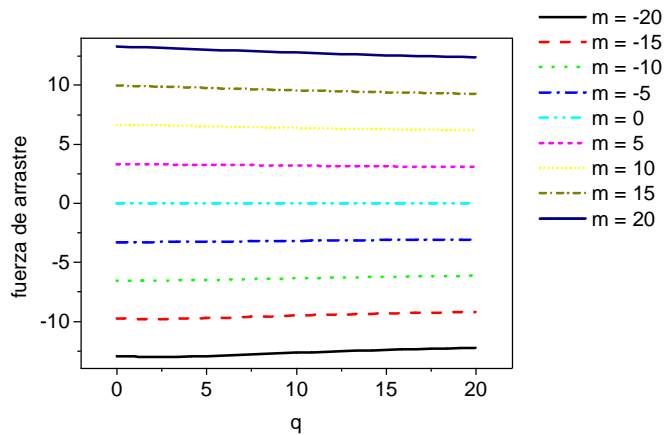


Figura 4.13a. \tilde{D}_{low} para m : (-20, 20)

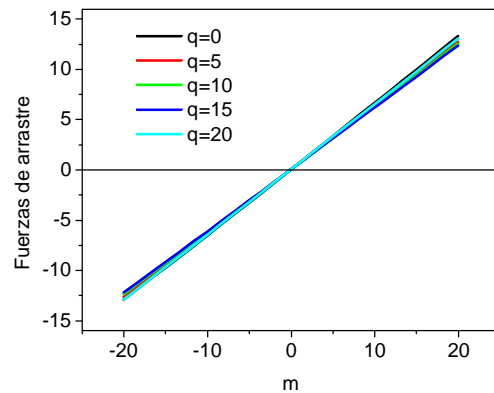


Figura 4.13b. \tilde{D}_{low} para q : (0, 20)



Capítulo 5 Conclusiones

En este trabajo se desarrolló un modelo hidrodinámico para describir el comportamiento de un cristal líquido nemático confinado en una celda, en la cual, la alineación de las moléculas es homeotrópica en una de las placas y homogénea en la otra, es decir, tiene una configuración híbrida. Esta celda se encuentra bajo la influencia simultánea de un campo eléctrico perpendicular a las placas y una diferencia de presión. El modelo se basa en la nematodinámica de Ericksen, Leslie y Parodi, de la cual se obtiene una ecuación diferencial para la orientación del director, la cual se encuentra acoplada a la ecuación de conservación de momento lineal. Estas ecuaciones se resuelven utilizando el método de disparo (Shooting) con el fin de encontrar la configuración del director y el perfil de velocidad de las moléculas de cristal líquido, a diferentes valores de campo eléctrico y flujo.

Las características más importantes del sistema son: la gran influencia que genera el campo eléctrico sobre la orientación de las moléculas de cristal líquido, así como también la diferencia que existe entre el comportamiento de las moléculas en presencia de una diferencia de presión positiva o una diferencia de presión negativa. Esta asimetría es consecuencia de la configuración inicial de las moléculas de cristal líquido en la celda y de su interacción con el flujo resultante.

Un aspecto a resaltar es el fenómeno que se presenta en la figura 4.3b, en el cual existe un punto dentro de la celda en el cual no importa cuánto valga la diferencia de presión, el valor del ángulo que presentan las moléculas de cristal líquido es el mismo.

Los resultados obtenidos para el perfil de velocidad indican que el sistema presenta un comportamiento claramente no-Newtoniano; sin embargo, también se puede observar que en presencia del campo eléctrico se inhibe este comportamiento, ya que la influencia del campo eléctrico sobre la viscosidad es mucho más importante que la producida por la diferencia de presión.

Es precisamente la influencia tan grande del campo eléctrico sobre la orientación de las moléculas de cristal líquido la que produce un comportamiento electro-reológico tan importante, es decir, la viscosidad del cristal líquido varía significativamente al variar el valor del campo eléctrico. Como se vio en el capítulo 2 de este trabajo, la viscosidad más baja posible en el sistema toma el valor de η_c , así como η_b representa la viscosidad mayor posible en el sistema. Así mismo, podemos concluir que la viscosidad del cristal líquido en la celda depende de la diferencia de presión aplicada, así como de la dirección en la cual se produzca el flujo de este último. Esto significa que el sistema presenta un comportamiento no-Newtoniano muy marcado con un carácter dual, es decir, para flujos positivos es pseudoplástico (“shear-thinning”), mientras que para flujos negativos es dilatante (“shear thickening”).



Finalmente, en lo que respecta a las fuerzas de arrastre en las placas, podemos concluir que en la placa superior de la celda las fuerzas de arrastre serán relativamente mas bajas que las de la placa inferior, debido a la alineación homogénea de las moléculas de cristal líquido en la placa superior de la celda y homeotrópica en la placa inferior. Otro aspecto a considerar es que la velocidad del flujo influye de manera directa en las fuerzas de arrastre obtenidas, puesto que a mayor flujo, mayor será la fuerza de arrastre resultante. El campo eléctrico también influye en las fuerzas de arrastre, ya que al colocar las moléculas de cristal líquido de forma vertical, origina que las fuerzas de arrastre se incrementen.

Como podemos ver, es muy prometedor el estudio del comportamiento reológico de estos materiales. Dentro de los estudios que podrían realizarse a futuro está, su comportamiento en diferentes geometrías, tal como son: celdas cilíndricas, capilares, su respuesta ante influencias externas simultáneas (como campos eléctricos y magnéticos aplicados simultáneamente), etc. Esperamos que este trabajo pueda aportar interés para estudios y aplicaciones posteriores, principalmente en microsistemas, para los cuales este tipo de materiales se adaptan de manera idónea.



Bibliografía

Libros

- [1] Blinov, L. et. Al. Cristales Líquidos, (Mir Moscu, URSS, 1985.)
- [2] Blinov, L. et. Al. Electrooptic effects in liquid crystal materials, (Springer-Verlag, Rusia, 1994.)
- [3] Bahadur, Birendra. Liquid Crystals Applications and uses, Vol. 1, (World Scientific, 1990.)
- [4] Collings, Peter. Liquid Cystals “Nature’s delicate phase of matter”, (Adam Hilger Bristol, USA, 1990.)
- [5] Donald, A. M. Liquid crystalline polymers, (Cambridge university press, Inglaterra, 1992.)
- [6] De Jue, W. Physical Properties of liquid Crystalline Materials, (Gordon and Breach Science Publishers, Inglaterra, 1943.)
- [7] Dunmur, David A. Liquid Crystals Fundamentals, (World Scientific, Singapur, 2001.)
- [8] Khoo, C. Liquid Crystals Physical properties and nonlinear optical phenomena, (John Wiley and sons. Inc, USA, 1995.)
- [9] Kleman, M. Soft Matter Physics, (Springer-Verlag, USA, 2003.)
- [10] Rodríguez Zepeda Rosalío, Líquidos exóticos, (Colección de ciencia para todos, FCE, segunda edición, México, 2001.)
- [11] Ronald G. Larson, “The structure and Rheology of complex fluids” Oxford University Press 1999, pp. 443 -455.
- [12] Wang, X. et. Al. Liquid crystalline polymers, (World Scientific, USA, 2002.)

Artículos

- [13] 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).
- [14] J. Adrian Reyes, O. Manero, y R.F. Rodriguez, “Electrorheology of nematic liquid crystals in uniform shear flow” Rheol Acta 40, 426 (2001).



-
- [15] R. F. Rodriguez, J. A. Reyes, y O. Manero, “Model for the electrorheological effect in flowing polymeric nematics” J. Chem. Phys. 110, 8197 (1999).
- [16] D. Marenduzzo, E. Orlandini, y J. M. Yeomans, “Interplay between shear flow and elastic deformations in liquid crystals”, J. Chem. Phys., 121, 582 (2004).
- [17] Colin Denniston, Enzo Orlandini, J.M. Yeomans “Simulations of liquid crystals in Poiseuille flow”, arXiv 12317 (2000).