



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MEXICO
POSGRADO EN CIENCIAS FÍSICAS

HIDRODINÁMICA FLUCTUANTE DE CRISTALES LÍQUIDOS NEMÁTICOS

TESIS
QUE PARA OPTAR POR EL GRADO DE:
DOCTOR EN CIENCIAS (FÍSICA)

PRESENTA:
JORGE FERNANDO CAMACHO PÉREZ

TUTOR PRINCIPAL
DR. ROSALÍO FERNANDO RODRÍGUEZ ZEPEDA
INSTITUTO DE FÍSICA, UNAM

MIEMBROS DEL COMITÉ TUTOR

DR. JUAN ADRIÁN REYES CERVANTES
INSTITUTO DE FÍSICA, UNAM

DR. LUIS FELIPE DEL CASTILLO DÁVILA
INSTITUTO DE INVESTIGACIONES EN MATERIALES, UNAM

CIUDAD UNIVERSITARIA, CD. MX., DICIEMBRE DE 2017



Universidad Nacional
Autónoma de México



UNAM – Dirección General de Bibliotecas
Tesis Digitales
Restricciones de uso

DERECHOS RESERVADOS ©
PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL

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

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

*Un viaje de mil millas
comienza con un pequeño paso.*

Lao Tsé (VI-IV a. C.)

A mis padres Yolanda y Fernando,

la memoria de mis tíos Carmen y Guillermo,

la memoria de mi tío Joaquín,

mi tío Jesús,

Martha y Daniel, y

Martha Daniela y María Fernanda.

Agradecimientos

El presente trabajo de investigación de tesis doctoral representa la culminación de una actividad desarrollada durante varios años, estando inscrito en el Posgrado en Ciencias Físicas (PCF) de la UNAM, en su sede del Instituto de Física (IF) ubicado en Ciudad Universitaria. Como estudiante del Doctorado en Ciencias (Física), obtuve una beca otorgada por la Dirección General de Estudios de Posgrado (DGEP) también de la UNAM. Deseo externar mi reconocimiento y agradecimiento, a nuestra máxima casa de estudios y, en particular, al IF, al PCF y a la DGEP por la formación académica y ayuda económica recibidas. Su notable labor representa una excelente oportunidad de desarrollo profesional para quienes cursamos una licenciatura en física o algún área afín y buscamos profundizar nuestros conocimientos en esta fascinante disciplina científica.

Este trabajo también se llevó a cabo en la Universidad Autónoma de la Ciudad de México (UACM). Agradezco a esta institución por brindarme un ámbito laboral y académico estimulante en el que he podido ejercer mi profesión y ampliar mis horizontes. Particularmente, quiero destacar la autorización para la realización de mi actual año sabático mediante una estancia de investigación en el Departamento de Sistemas Complejos del IF, así como las facilidades otorgadas para la impresión de esta tesis.

Asimismo, quiero agradecer a las personas que, directa o indirectamente, forman parte de este logro.

En primer lugar, a mi director de tesis, el Dr. Rosalío Fernando Rodríguez Zepeda, mi más amplio agradecimiento por haberme confiado este trabajo de investigación. Su paciencia, experiencia y dedicación fueron determinantes en el desarrollo y desenlace de esta tesis. Muchas gracias Dr. Rosalío, por todos estos años de colaboración que sin duda han contribuido a enriquecer mi vida profesional y personal.

A los doctores Juan Adrián Reyes Cervantes y Luis Felipe del Castillo Dávila, integrantes de mi Comité Tutorial, por la revisión de la tesis y sus comentarios.

A las doctoras Rosa María Velasco Belmont, María del Pilar Constanza Ortega Bernal y Jacqueline Quintana Hinojosa, así como a los doctores Mariano López de Haro, Denis Pierre Boyer y José Inés Jiménez Aquino, por aceptar formar parte del jurado y dictaminar este trabajo de investigación desarrollado como

tesis. Sus observaciones y sugerencias aportaron mejoras a la claridad y organización del material que aquí se expone.

A los doctores Germinal Cocho Gil, Pedro Miramontes Vidal, Faustino Sánchez Garduño y Jorge Fujioka Rojas, por su respaldo, motivación y consejos.

A mis compañeros y amigos, donde quiera que se encuentren. En particular, del IF: Alberto, Rosario, Miguel y Marco, con quienes compartí cubículo en los inicios de mi doctorado; Pilar, Carlos, Elizabeth, Héctor y demás integrantes de la pandilla; y Marcela, Pablo y Guillermina, por la ayuda brindada en la biblioteca. Desde luego, también de la UACM: Maruxa, Fernando, Damián y José Luis, quienes forman parte de la Maestría en Ciencias de la Complejidad; y Martha, de la Coordinación Académica. Muchas gracias a todos ustedes por su amistad, por compartir no sólo un espacio, sino también tantos momentos entrañables.

Por último, quiero agradecer a mis padres Yolanda y Fernando, por su gran cariño, apoyo y paciencia, por creer en mí y en mis expectativas.

A todos ustedes, que me apoyaron durante la realización de esta tesis, mi mayor aprecio y gratitud.

Índice general

Agradecimientos	V
Índice de figuras	XIII
Índice de tablas	XVII
Publicaciones	XIX
Introducción	1
I Hidrodinámica fluctuante de cristales líquidos nemáticos en el estado de equilibrio termodinámico	11
1. Ecuaciones hidrodinámicas de un cristal líquido nemático	13
1.1. Introducción	13
1.2. Cristales líquidos	14
1.2.1. Parámetro de orden y vector director	15
1.3. Nemáticos	17
1.3.1. Simetría uniaxial	18
1.3.1.1. Anisotropía dieléctrica	19
1.3.2. Deformaciones elásticas	19
1.3.3. Descripción termodinámica	20
1.3.3.1. Desplazamientos y fuerzas generalizados para un medio nemático	21
1.4. Descripción hidrodinámica	27
1.4.1. Ecuaciones de movimiento de balance y conservación	27
1.4.1.1. Modos hidrodinámicos	28
1.4.2. Principios de conservación de masa, cantidad de movimiento y energía	29
1.4.2.1. Ecuación de conservación de masa	29
1.4.2.2. Ecuación de balance de la cantidad de movimiento	29

1.4.2.3.	Ecuación de conservación de la energía	30
	Potencial termodinámico generalizado de energía	31
1.5.	Rompimiento de simetrías	33
1.5.1.	Ecuación de balance del director	34
1.6.	Ecuación de balance de entropía	37
1.6.1.	Producción de entropía	37
1.6.2.	Ecuación general de transferencia de calor	40
1.6.3.	Variación de la entropía total	41
1.7.	Fuerzas y flujos termodinámicos	42
1.7.1.	Densidades de corriente disipativas	45
1.7.1.1.	Tensor de esfuerzos viscosos	46
1.7.1.2.	Flujo de calor	47
1.7.1.3.	Cuasicorriente del director	47
1.8.	Ecuaciones nematodinámicas	48
2.	Nematodinámica fluctuante	53
2.1.	Introducción	53
2.2.	Teoría de Fox y Uhlenbeck	54
2.2.1.	Respecto a la formulación de Onsager-Machlup	57
2.3.	Nematodinámica fluctuante	58
2.3.1.	Ecuaciones nemáticas lineales fluctuantes	58
2.3.2.	Teoremas de fluctuación-disipación de un nemático	67
2.3.3.	Ecuaciones nematodinámicas fluctuantes linealizadas	68
2.3.4.	Interpretación según la formulación de Landau y Lifshitz	70
3.	Dispersión de luz y factor de estructura dinámico	73
3.1.	Introducción	73
3.2.	Teoría general de dispersión de luz	74
3.2.1.	Geometrías de dispersión	76
3.2.2.	Metodos de detección experimentales	76
3.2.3.	Densidad espectral y factor de estructura dinámico	78
3.3.	Dispersión de luz en un cristal líquido nemático	80
3.3.1.	Tensor dieléctrico nemático	81
3.3.2.	Geometrías de dispersión y métodos de detección para nemáticos	82
3.3.3.	Espectro de dispersión de luz en el estado de equilibrio	85

II Aplicaciones: Modos hidrodinámicos y espectros de dispersión de luz de un nemático en estados estacionarios fuera de equilibrio termodinámico 87

4. Modos hidrodinámicos de un nemático bajo un gradiente de temperatura uniforme y un campo gravitatorio constante externo	89
4.1. Introducción	89
4.2. Modelo	91
4.2.1. Estado estacionario	91
4.2.2. Ecuaciones nematodinámicas fluctuantes	93
4.2.3. Cambio al conjunto de variables δp y δs	96
4.2.4. Cambio de representación de las variables hidrodinámicas fluctuantes	98
4.2.5. Nemático en equilibrio y fluido simple en un sistema de Rayleigh-Bénard	102
4.2.5.1. Nemático en el estado de equilibrio	102
4.2.5.2. Fluido simple en un sistema de Rayleigh-Bénard	102
4.3. Modos hidrodinámicos	103
4.3.1. Modos longitudinales	105
4.3.1.1. Modos longitudinales acústicos	106
4.3.1.2. Modos longitudinales visco-calóricos y del director	107
4.3.1.3. Valores de $R(\vec{k})/R_c$	110
Modos propagativos y difusivo	110
Modos puramente difusivos	111
4.3.2. Modos transversales	112
4.3.2.1. Modos transversales de cizalla y del director	112
4.4. Modos de un nemático en equilibrio y un fluido simple en un sistema de Rayleigh-Bénard	113
4.4.1. Nemático en el estado de equilibrio	113
4.4.2. Fluido simple en un sistema de Rayleigh-Bénard	114
4.4.2.1. Valores de $R(\vec{k})/R_c$	114
Modos propagativos	115
Modos puramente difusivos	115
5. Espectro de dispersión de luz de un nemático bajo un gradiente de temperatura uniforme y un campo gravitatorio constante externo	117
5.1. Introducción	117
5.2. Factor de estructura dinámico	118
5.2.1. Geometrías de dispersión nemáticas	120
5.2.1.1. Geometría de dispersión $H-H$	121
5.2.1.2. Geometría de dispersión $V-H$	122

5.3.	Fluctuaciones y valores de $R(\vec{k})/R_c$	122
5.3.1.	Fluctuaciones propagativas y difusiva	122
5.3.2.	Fluctuaciones puramente difusivas	123
5.4.	Espectro de Rayleigh	124
5.4.1.	Efectos del gradiente de temperatura	125
5.4.2.	Efectos de la gravedad	128
5.4.3.	Efectos simultáneos de la gravedad y del gradiente de temperatura	129
5.4.3.1.	Calentamiento por debajo	130
5.4.3.2.	Calentamiento por arriba	130
5.5.	Función de dispersión intermedia	132
6.	Espectro de dispersión de luz de un nemático bajo un gradiente de presión constante externo	135
6.1.	Introducción	135
6.2.	Modelo	136
6.2.1.	Estado estacionario	136
6.3.	Ecuaciones nematodinámicas linealizadas	138
6.4.	Factor de estructura dinámico	141
6.4.1.	Aproximación perturbativa	141
6.5.	Espectro de dispersión	144
6.5.1.	Geometría de dispersión $V-H$	144
	Conclusiones	147
A.	Relaciones de fluctuación-disipación generalizadas para una capa nemática en un sistema de Rayleigh-Bénard	153
B.	Separación de los conjuntos de variables \vec{Z}_X^L y \vec{Z}_Y^L, y cálculo de las raíces de $p_{YY}^L(\lambda)$	157
B.1.	Separación de \vec{Z}_X^L y \vec{Z}_Y^L en conjuntos independientes	157
B.2.	Aproximación de las raíces del polinomio característico $p_{YY}^L(\lambda)$	161
	Caso particular	162
B.2.1.	Aproximación de las raíces del polinomio $p_{YY}^L(\lambda)$	162
B.2.2.	Modos longitudinales visco-calóricos y del director	165
B.2.2.1.	Límite del fluido simple en un sistema de Rayleigh-Bénard	166
B.2.3.	Forma alternativa de aproximar las raíces de $p_{YY}^L(\lambda)$	166

C. Funciones de autocorrelación y correlación cruzada de las variables longitudinales z_3 y z_5	171
C.1. Autocorrelación de $z_3 \left(\vec{k}, \omega \right)$	172
C.2. Autocorrelación de $z_5 \left(\vec{k}, \omega \right)$	173
C.3. Correlaciones cruzadas entre $z_3 \left(\vec{k}, \omega \right)$ y $z_5 \left(\vec{k}, \omega \right)$	174
D. Factor de estructura dinámico de un nemático en un sistema de Rayleigh-Bénard	177
D.1. Geometría de dispersión $H-H$	179
D.1.1. Valores de $R(\vec{k})/R_c$	182
D.2. Geometría de dispersión $V-H$	183
E. Parámetros materiales del nemático MBBA	185
Bibliografía	187
Lista de símbolos	195
Índice alfabético	209

Índice de figuras

1.1. Representación de la orientación promedio de las moléculas de un cristal líquido nemático por medio del vector director \vec{n}	18
3.1. Representación esquemática de un experimento típico de dispersión de luz. Consta de fuente de luz monocromática (láser), polarizador, muestra dispersora, analizador y detector.	74
3.2. Geometrías comúnmente utilizadas en experimentos de dispersión de luz. En ellas se consideran los vectores de onda incidente \vec{k}_i y dispersado \vec{k}_f (que se encuentran en el plano de dispersión P), así como sus correspondientes polarizaciones \hat{i} y \hat{f} . Las geometrías son: a) $\hat{i} \perp P$ y $\hat{f} \parallel P$ ($V-H$), b) $\hat{i} \perp P$ y $\hat{f} \perp P$ ($V-V$), c) $\hat{i} \parallel P$ y $\hat{f} \parallel P$ ($H-H$) y d) $\hat{i} \parallel P$ y $\hat{f} \perp P$ ($H-V$).	77
3.3. Geometrías empleadas generalmente en experimentos de dispersión de luz para nemáticos. En ellas, el haz incidente, de polarización \hat{i} , es perpendicular a las placas, en tanto que el director \hat{n}_0 es perpendicular (homeotrópo) o paralelo (planar) a las mismas. Éstas son: Configuración 1, a) \hat{n}_0 homeotrópo y con \hat{i} ambos paralelos al plano de dispersión P ; y Configuración 2, b) \hat{n}_0 planar paralelo a P e \hat{i} perpendicular a éste, y c) \hat{n}_0 planar y con \hat{i} ambos perpendiculares a P	82
3.4. Espectro típico de dispersión de luz $S(\vec{k}, \omega)$ de un cristal líquido nemático, en el estado de equilibrio termodinámico. Consta de un pico central de Rayleigh, de mayor intensidad localizado en $\omega = 0$, y de dos picos de Brillouin, simétricamente situados a ambos lados del anterior en $\omega = \pm\omega_B$. Se muestran las alas de Rayleigh, que es una zona ancha en la parte baja del pico central.	85
4.1. Representación esquemática de una celda de cristal líquido nemático homeotrópa plana bajo la presencia de un campo gravitacional \vec{g} constante y un gradiente de temperatura externo ∇T uniforme producido por las diferentes temperaturas T_1 y T_2 ($T_1 > T_2$) en las placas. \vec{k} es el vector de dispersión.	91

- 4.2. Representación esquemática de la parte real de las tasas de decaimiento visco-calóricas λ_3 y λ_4 como función de la razón de Rayleigh $R(\vec{k})/R_c$. Si $R(\vec{k})/R_c < R_0$, entonces ambas son propagativas. Cuando $R_0 \leq R(\vec{k})/R_c \leq 1$, son completamente difusivas. Así, si $R(\vec{k})/R_c = R_0$, entonces $\lambda_{3,4} = \frac{1}{2} \left(D_T k^2 + \sigma_3 k^2 - \frac{\Omega^2 K_I k^2}{\rho_0 \sigma_3} \right)$; cuando $R(\vec{k})/R_c = 0$ (es decir, en el límite de equilibrio), $\lambda_3 \simeq D_T k^2$ y $\lambda_4 \simeq \sigma_3 k^2 - \frac{\Omega^2 K_I k^2}{\rho_0 \sigma_3}$. Eventualmente, si $R(\vec{k})/R_c = 1$ (al inicio del régimen convectivo), entonces $\lambda_3 = 0$ y $\lambda_4 = D_T k^2 + \sigma_3 k^2 - \frac{\Omega^2 K_I k^2}{\rho_0 \sigma_3}$ 109
- 5.1. Representación esquemática de una celda líquido cristalina plana de configuración homeótropa en presencia de un campo gravitacional constante \vec{g} y un gradiente de temperatura externo ∇T producido por la diferencia de temperaturas ($T_1 > T_2$) entre las placas. \vec{k}_i es el vector de onda de la luz incidente y \vec{k}_f el vector de onda de la luz dispersada, $\vec{k} = \vec{k}_i - \vec{k}_f$ es el vector de onda de dispersión y θ es el ángulo de dispersión. k_\perp y k_\parallel son, respectivamente, las componentes de \vec{k} perpendicular y paralela a \vec{n}_0 . Además, \hat{i} y \hat{f} son, respectivamente, las polarizaciones de los haces incidente y dispersado. 118
- 5.2. Amplitudes a) $E_3^{neq}(\vec{k})$, b) $E_4^{neq}(\vec{k})$ y c) $E_5^{neq}(\vec{k})$ de las fluctuaciones de no equilibrio como función de $|\alpha|^2/k^4$ para una capa nemática de MBBA. 126
- 5.3. Factor de estructura dinámico normalizado $\tilde{S}(\vec{k}, \tilde{\omega})$ como función de la frecuencia angular normalizada $\tilde{\omega}$ para una capa nemática de MBBA sin la presencia del campo gravitacional ($g = 0$). En este caso el espectro de Rayleigh consta de una lorentziana localizada en el centro determinada principalmente por las contribuciones de las fluctuaciones del director (curva a)). En el recuadro se compara la curva a) con contribuciones de las fluctuaciones de la entropía (alas de Rayleigh) para tres gradientes de temperatura diferentes: b) $\alpha = 0$, c) $\alpha = 0.6K/cm$ y d) $\alpha = 2K/cm$. Aquí $k_i = 1.588 \times 10^5 cm^{-1}$ y $k = 285.87 cm^{-1}$ (que corresponde a $\theta = 1.8 \times 10^{-3} rad \simeq 0.1^\circ$). 127
- 5.4. Factor de estructura dinámico normalizado $\tilde{S}(\vec{k}, \tilde{\omega})$ como función de la frecuencia angular normalizada $\tilde{\omega}$, para una capa nemática de MBBA bajo la presencia sólo del campo gravitatorio $g = 980 cm/s^2$ y sin la influencia de un gradiente de temperatura ($\alpha = 0$). Los ángulos de dispersión considerados son: $\theta = 1.0 \times 10^{-6} rad$ (línea continua), $\theta = 0.6 \times 10^{-6} rad$ (línea discontinua) y $\theta = 0.45 \times 10^{-6} rad$ (línea punteada). 130
- 5.5. Factor de estructura dinámico normalizado $\tilde{S}(\vec{k}, \tilde{\omega})$ como una función de la frecuencia angular normalizada $\tilde{\omega}$, para una capa nemática de MBBA bajo la presencia del campo gravitatorio $g = 980 cm/s^2$ y calentada desde arriba por un gradiente de temperatura $\alpha = -220K/cm$. Los ángulos de dispersión considerados son: $\theta = 1.8 \times 10^{-4} rad$ (línea continua), $\theta = 1.0 \times 10^{-4} rad$ (línea discontinua) y $\theta = 0.7 \times 10^{-4} rad$ (línea punteada). 131

- 5.6. Función de dispersión intermedia $\tilde{I}^{dif}(k, t)$ para una capa nemática de MBBA obtenida con $k = 2250\text{cm}^{-1}$ para, a) el estado de equilibrio ($\alpha = 0\text{ K/cm}$), y diferentes estados de no equilibrio debidos a los cuatro gradientes de temperatura: b) $\alpha = 70\text{ K/cm}$, c) $\alpha = 120\text{ K/cm}$, d) $\alpha = 170\text{ K/cm}$ y e) $\alpha = 220\text{ K/cm}$ 133
- 6.1. Representación esquemática de la celada nemática homeótropa plana sujeta a un gradiente de presión externo ∇p . \vec{k}_i es el vector de onda de la luz incidente y \vec{k}_f el vector de onda de la luz dispersada, $\vec{k} = \vec{k}_i - \vec{k}_f$ es el vector de onda de dispersión y θ es el ángulo de dispersión. Además, \hat{i} y \hat{f} son, respectivamente, las polarizaciones de los haces incidente y dispersado. 137
- 6.2. Factor de estructura dinámico normalizado $\tilde{S}(\vec{k}, \tilde{\omega})$ como una función de la frecuencia angular normalizada $\tilde{\omega}$, para una capa nemática de MBBA bajo la presencia de un gradiente de presión ∇p . Para $k_i = 1.14 \times 10^5\text{cm}^{-1}$ y $\theta \sim 1^\circ$, se consideraron los gradientes de presión reales $\nabla p = 0$ (línea continua), $\nabla p = 0.1\text{ atm/cm}$ (línea punteada) y $\nabla p = 0.25\text{ atm/cm}$ (línea discontinua). 145

Índice de tablas

E.1. Parámetros materiales del cristal líquido nemático MBBA	185
--	-----

Publicaciones

Los resultados de esta tesis se han publicado en

Artículos en revistas:

- Jorge F. Camacho and Rosalío. F. Rodríguez, Eur. Phys. J. B **90**, 22 (2017).
- Jorge F. Camacho and Rosalío. F. Rodríguez, Eur. Phys. J. B **90**, 21 (2017).
- J. F. Camacho and R. F. Rodríguez, arXiv:1604.08250, [cond-mat, soft] 27 Apr 2016.
- J. F. Camacho, H. Híjar and R. F. Rodríguez, Physica A **348**, 252 (2005).
- R. F. Rodríguez and J. F. Camacho, Rev. Mex. Fís. **48** (S1), 144 (2002).

Capítulos de libros:

- R. F. Rodríguez and J. F. Camacho in *Recent Developments in Mathematical and Experimental Physics*, Vol. B Statistical Physics and Beyond, A Macias, E. Díaz and F. Uribe, editors (Kluwer, New York, 2003) pp. 197-214

Declaración

Declaro que el contenido de este trabajo de investigación de tesis doctoral es original y que todas las fuentes bibliográficas utilizadas para su realización han sido citadas debidamente en el mismo. Además, no ha sido presentado total o parcialmente para su consideración en la obtención de algún otro grado académico previo o título profesional en esta ni en cualquier otra universidad o institución.

Esta tesis es el resultado de mi propio trabajo personal y no incluye ideas, materiales o resultados que hayan sido publicados o escritos anteriormente por otros autores, excepto aquellos que, por pertenecer precisamente a otros autores, se les ha dado el reconocimiento debido y han sido citados adecuadamente en el texto o las referencias.

Introducción

Cuando un fluido se encuentra en equilibrio termodinámico sus variables de estado siempre experimentan fluctuaciones microscópicas espontáneas debidas a las excitaciones térmicas de sus moléculas, produciendo desviaciones alrededor del estado de equilibrio. Si una perturbación externa se aplica a un fluido en equilibrio termodinámico, su efecto se amortigua generando procesos de relajación que se manifiestan macroscópicamente, por ejemplo, como difusión, viscosidad o conducción térmica y determinan las propiedades de transporte del fluido. Sin embargo, desde un punto de vista microscópico, siempre existen fluctuaciones; es decir, desviaciones aleatorias microscópicas espontáneas alrededor del estado de equilibrio, debidas a los movimientos térmicos de sus moléculas.

Microscópicamente, las fluctuaciones se producen con distribuciones de longitudes de onda y frecuencias propias del sistema, y se disipan en el medio de la misma manera como lo hacen las perturbaciones externas para estados cercanos al equilibrio. De la observación de la dinámica de estas fluctuaciones se obtiene información sobre la estructura del fluido a diferentes escalas espacio-temporales [1]. A longitudes de onda largas y frecuencias bajas, el fluido se comporta como un continuo y su dinámica puede ser descrita por las ecuaciones de la *hidrodinámica*. En cambio, a longitudes de onda comparables con las distancias intermoleculares, la estructura (molecular) local es dominante y debe describirse como un conjunto de partículas interactuantes mediante la *dinámica molecular*. En el presente trabajo nos restringiremos a una descripción hidrodinámica que tome en cuenta los grados de libertad microscópicos a través de las fluctuaciones.

La suposición básica de la hidrodinámica radica en que los cambios en el estado de un fluido se producen con la suficiente lentitud para que pueda suponerse que el sistema está en un estado de equilibrio termodinámico local. Bajo esta condición se obtiene un conjunto de ecuaciones cerradas que describen las variaciones espaciales y temporales de las variables conservadas como las densidades de masa, número de partículas, de cantidad de movimiento y de energía. Para que la descripción sea completa es necesario especificar los valores de las derivadas termodinámicas y los coeficientes de transporte; sin embargo, estas cantidades no pueden ser determinadas por la teoría hidrodinámica, por lo que deben proveerse experimentalmente o por teorías microscópicas. Las ecuaciones de la hidrodinámica son válidas cuando las variaciones espaciales y temporales son lentas y pequeñas en las escalas típicas de los procesos moleculares, como son la trayectoria libre media y la duración de las colisiones. Esta restricción delimita también los valores del número de onda k y la frecuencia angular ω ; por lo tanto, la hidrodinámica es válida en la región de (k, ω) bajas. Cuando

esta condición no se satisface completamente, a menos que se esté muy alejado de la región hidrodinámica (k, ω) , las discrepancias aparecen de manera sutil y gradual. La transición suave significa que es conveniente extender la descripción hidrodinámica conservando la estructura básica de las ecuaciones, pero reemplazando las derivadas termodinámicas y los coeficientes de transporte por funciones que pueden variar en el espacio o en el espacio y el tiempo. El resultado puede considerarse entonces como una descripción hidrodinámica generalizada, válida en intervalos más amplios de variaciones espaciales y temporales.

Es importante señalar que cuando un sistema hidrodinámico relaja desde un estado de equilibrio termodinámico a otro, casi todos sus grados de libertad retornarán a dicho valor de equilibrio en un tiempo τ corto, finito y determinado por las interacciones microscópicas del sistema. Existen sin embargo, algunos otros grados de libertad de carácter colectivo — denominados *modos hidrodinámicos* — que decaerán en una forma mucho más lenta. En éstos, cuando $\tau \rightarrow \infty$, sus frecuencias características $\omega \rightarrow 0$ ($\omega \sim 1/\tau$), cuando $k \rightarrow 0$. Tal es el caso por ejemplo, de la propagación de las ondas sonoras y de la conducción del calor en un fluido simple [2]. La hidrodinámica permite describir estos modos o grados de libertad de mayor duración, a través de las leyes de conservación y de balance del sistema, o como en el caso de sistemas ordenados, mediante rompimientos continuos de simetrías [3], [4]

Los primeros intentos para describir las fluctuaciones en fluidos en estados cercanos al equilibrio termodinámico, fueron iniciados por Einstein y Onsager. Trabajos posteriores permitieron desarrollar la *hidrodinámica fluctuante*, propuesta originalmente por Landau y Lifshitz [5] y formulada posteriormente en forma sistemática y consistente con la teoría de procesos estocásticos por Fox y Uhlenbeck [6]. La hidrodinámica fluctuante parte de la suposición de que las ecuaciones hidrodinámicas son válidas para cualquier movimiento del fluido, incluso, para el debido a las fluctuaciones de sus variables de estado. En este caso, las variables hidrodinámicas deben interpretarse como la suma de sus valores promedio en equilibrio, más los de sus fluctuaciones termodinámicas alrededor del equilibrio. Dado que experimentalmente sabemos que alrededor del estado de equilibrio las fluctuaciones son pequeñas, pueden despreciarse aquellos términos que den lugar a potencias de órdenes mayores a uno en dichas fluctuaciones, de modo que resulta posible linealizar las ecuaciones. De este modo, el grupo de ecuaciones hidrodinámicas que usualmente son no lineales, para las fluctuaciones se reduce a un conjunto completo de ecuaciones diferenciales lineales.

En la hidrodinámica fluctuante, el objetivo principal consiste en calcular las *funciones de correlación dependientes del tiempo* en equilibrio entre las variables hidrodinámicas fluctuantes, las cuales permiten obtener los coeficientes de transporte del sistema [7]. Green y Kubo mostraron que los coeficientes fenomenológicos que describen una gran cantidad de procesos de transporte y fenómenos dependientes del tiempo, en general pueden ser escritos como integrales de las llamadas funciones de correlación dependientes del tiempo [7], [8]. Éstas son funciones espacio-temporales que permiten cuantificar el grado en el que dos propiedades dinámicas de un sistema físico están correlacionadas durante un determinado intervalo de tiempo¹.

¹Si la correlación se establece entre dos propiedades dinámicas idénticas, se obtiene lo que se denomina como *función de autocorrelación*; en cambio, si las propiedades dinámicas consideradas son distintas, se tiene una *función de correlación cruzada*.

Las funciones de correlación dependientes del tiempo permiten describir la dinámica de las fluctuaciones térmicas y la respuesta de un fluido ante una perturbación externa débil. Esto es así porque en este caso los procesos dinámicos básicos que gobiernan cómo las fluctuaciones térmicas se disipan en el espacio y el tiempo, obedecen las mismas ecuaciones que los procesos macroscópicos que determinan la respuesta del fluido (hipótesis de regresión de Onsager). La consistencia entre las fluctuaciones espontáneas y la respuesta lineal es la razón por la cual las funciones de correlación dependientes del tiempo también son las cantidades centrales en el estudio de los fenómenos de transporte en fluidos. Las funciones de correlación dependientes del tiempo juegan un papel en la mecánica estadística de no equilibrio similar al que desempeña en la mecánica estadística de equilibrio la función de partición. Esto se debe al siguiente hecho: el estado de equilibrio termodinámico es único y sólo se requiere especificar la función de partición para determinar todas las propiedades termodinámicas. En cambio, existe una gran variedad de estados de no equilibrio, tantos como maneras distintas de sacar al sistema de un estado de equilibrio inicial, por lo que se necesitarán distintas funciones de correlación dependientes del tiempo para cada tipo de proceso. Una de las ventajas del formalismo de las funciones de correlación radica en que las fórmulas resultantes para los coeficientes de transporte son bastante generales en el sentido de que no dependen de los detalles de un modelo particular y no están limitadas por una región de densidad determinada. Otra ventaja de este formalismo estriba en que permite obtener ecuaciones exactas, que si bien pueden ser difíciles de resolver, permiten introducir aproximaciones bien definidas.

Como se mencionó anteriormente, existen varios métodos para obtener las funciones de correlación, pero una metodología particularmente útil a nivel mesoscópico es la que propusieron Landau y Lifshitz [5], la cual consiste, básicamente, en añadir un tensor de esfuerzos y un vector de flujo de calor estocásticos a las ecuaciones hidrodinámicas linealizadas alrededor del estado de equilibrio termodinámico. De esta manera las ecuaciones fluctuantes linealizadas que se obtienen son ecuaciones estocásticas del tipo Langevin con ruido aditivo, y las propiedades de correlación de los ruidos se deducen a partir de la teoría de Onsager-Machlup [9]. Mediante este método, se establece una conexión entre los flujos aleatorios y las propiedades de transporte del fluido, dando lugar así al llamado teorema o relación de fluctuación-disipación. De esta manera, las funciones de correlación entre las variables hidrodinámicas del sistema, se obtienen a través de dichas relaciones. Otra forma de calcular las funciones de correlación fue propuesta por Mountain [10], en ella se obtienen las correlaciones entre las fluctuaciones de las variables hidrodinámicas directamente de las ecuaciones hidrodinámicas linealizadas, sin añadirles a éstas ningún término de naturaleza aleatoria.

Una de las técnicas experimentales más poderosas y usadas para estudiar y medir las funciones de correlación de las fluctuaciones en un fluido, son los experimentos de dispersión de luz [11]. Precisamente es aquí en donde la hidrodinámica fluctuante juega su papel principal, ya que proporciona el marco teórico adecuado para describir las fluctuaciones de las variables de estado, basado en la validez de las ecuaciones hidrodinámicas generales. En estos experimentos se hace incidir un haz de luz monocromático sobre un fluido el cual la dispersa debido a las inhomogeneidades de su tensor dieléctrico producidas por las fluctua-

ciones térmicas. Las inhomogeneidades dieléctricas pueden ser estáticas o dinámicas y se originan a partir de fluctuaciones moleculares o intramoleculares en el fluido. Las correlaciones espaciales y temporales de las fluctuaciones del tensor dieléctrico producen el factor de estructura dinámico $S(\vec{k}, \omega)$ del sistema, que no es más que la transformada espacio-temporal de Fourier de la correlación de las fluctuaciones del tensor dieléctrico del medio dispersor [12]. Esta cantidad cuantifica la magnitud de los cambios de energía y de cantidad de movimiento entre el haz de luz y el fluido como funciones del vector de onda \vec{k} y ω . En sistemas como un fluido simple, la correlación de las fluctuaciones del tensor dieléctrico puede expresarse en términos de funciones de autocorrelación dependientes del tiempo y de la densidad. A partir de la medición experimental del factor de estructura dinámico se obtiene el espectro de dispersión de luz o de Rayleigh-Brillouin [10], [13], [14]. Así, para fluidos simples, a una \vec{k} fija, $S(\vec{k}, \omega)$ consiste de tres funciones lorentzianas perfectamente separadas: una línea o pico central (pico de Rayleigh) situada en $\omega = 0$ y dos picos situados simétricamente respecto a éste que reciben el nombre de picos de Brillouin [15], [16]. Estas tres líneas están directamente relacionadas con los modos hidrodinámicos del fluido simple y de ellas se obtiene información relevante acerca de propiedades de transporte del medio. La línea de Rayleigh, asociada con un modo difusivo térmico, es debida a las fluctuaciones de la entropía (o temperatura) que se difunden en el medio y su ancho es proporcional a la difusividad térmica de éste; en tanto que las líneas de Brillouin, relacionadas con dos modos propagativos acústicos, son resultado de la dinámica acoplada de las fluctuaciones de la presión y una componente de la velocidad que se transmiten con la velocidad del sonido en el medio y sus anchos son proporcionales a la absorción del sonido en éste.

La intensidad de la luz dispersada contiene información sobre la magnitud de las fluctuaciones, mientras que el cambio de frecuencia o la función de correlación de densidades dependiente del tiempo de la luz dispersada, contiene información sobre su dinámica. Dependiendo de la dirección de la luz dispersada en relación a la de la luz incidente, se pueden estudiar fluctuaciones en una escala de longitud que varía desde una fracción de la longitud de onda hasta un límite experimental de varios cientos de veces la longitud de onda de la luz incidente. La dispersión de la luz se ha utilizado para investigar las fluctuaciones en la materia condensada que se originan a partir de los modos hidrodinámicos del sistema, que existen a partir de leyes de conservación o simetría. Éstos se caracterizan por tiempos de decaimiento que son proporcionales a alguna potencia de la longitud de onda. Entre éstos se encuentran los “modos de Goldstone”, que son excitaciones colectivas de larga duración asociadas con una simetría que puede romperse continuamente y, por lo tanto, tienen fuerzas restauradoras que desaparecen en el límite de escala de longitud infinita [17].

En un fluido isótropo convencional, por ejemplo, la conservación de la masa, la energía y la cantidad de movimiento determinan el comportamiento hidrodinámico en las fluctuaciones de la densidad, temperatura y las tres componentes de la cantidad de movimiento. La solución de las ecuaciones de movimiento linealizadas para las fluctuaciones del sistema conduce a dos modos de propagación acústicos y tres modos difusivos (dos de cizallamiento y uno térmico). Estos modos tienen frecuencias típicas en el rango de MHz a GHz , y usualmente se miden usando la técnica de dispersión de Brillouin. Además, otra clase de fluctuaciones que

pueden dar lugar a la dispersión de la luz se origina en los grados de libertad internos de las moléculas. Estos modos intramoleculares conducen a la dispersión Raman que tiene cambios de frecuencia de más de $10^9 Hz$. La dispersión de Raman en los fluidos es generalmente un estudio local que proporciona poca información sobre el comportamiento colectivo del sistema.

El comportamiento de las fluctuaciones que ocurren en un fluido simple que se encuentra en un estado estacionario fuera de equilibrio termodinámico ocasionado por la presencia de un gradiente externo, ha despertado considerable interés y ha sido abordado desde diversos puntos de vista. La extensión de la hidrodinámica fluctuante para describir estados fuera del equilibrio estacionarios se sustenta en la suposición de que la estadística de las fuerzas estocásticas en dicho estado, es la misma que en el equilibrio [18], [19]. Bajo esta hipótesis usualmente se reescriben las correlaciones de los flujos estocásticos al sustituir sus propiedades termodinámicas de equilibrio y coeficientes de transporte por sus correspondientes valores con dependencia espacial. Si bien los trabajos iniciales al respecto se basaron en la teoría cinética [20], [21] y la teoría de respuesta lineal [22], [23], pronto se encontró que la hidrodinámica fluctuante [18], [24], [25], [26], [27], puede generalizarse de forma directa para aplicarse también en el caso de no equilibrio [28], [29], [30]. El efecto de una fuerza conservativa actuando sobre un sistema hidrodinámico puede abordarse dentro de este marco teórico. En el caso de un gradiente de temperatura uniforme actuando en un fluido simple, la aplicación de los métodos señalados en el cálculo de $S(\vec{k}, \omega)$ muestran que la línea de Rayleigh no presenta cambios, mientras que existen modificaciones en las líneas de Brillouin que se manifiestan en asimetrías en sus alturas y anchuras, siendo éstas proporcionales a la magnitud del gradiente aplicado. Para el gradiente de flujo de corte, dichos formalismos predicen también modificaciones similares en las intensidades de dichas líneas espectrales [27]. Experimentalmente se han podido corroborar las predicciones mencionadas [31], [32], [33]. Beysens et al. [31] encontraron que para una celda con agua líquida sujeta a un gradiente de temperatura externo, las asimetrías en los picos de Brillouin, concuerdan con las predicciones teóricas señaladas.

Los estudios de las fluctuaciones en fluidos complejos son relativamente abundantes. Algunos de estos sistemas como los fluidos viscoelásticos alrededor de estados en equilibrio [34], fluidos viscoelásticos bajo un gradiente externo de temperatura [35], suspensiones en fluidos viscoelásticos bajo gradientes de densidad y velocidad [36] y suspensiones coloidales incluyendo efectos de memoria [37], han sido tratados desde el punto de vista de la hidrodinámica fluctuante. Cabe mencionar que también existen en la literatura estudios de las fluctuaciones en fluidos complejos, desde el punto de vista de Mountain [38], [39], [40], [41], [42], [43].

Si bien para los cristales líquidos termótrapos (de bajo peso molecular) está bien establecida una descripción hidrodinámica [3], [44], [45], [46], [47], no existe en la literatura una formulación sistemática de la hidrodinámica fluctuante para este tipo de sistemas. Una manera en que se introducen fluctuaciones en la descripción hidrodinámica de los nemáticos, es a través de generalizaciones de las ecuaciones de Ginzburg-Landau dependientes del tiempo, las cuales se desarrollan para describir la dinámica de las fluctuaciones cerca de puntos críticos [48]. No obstante que estos métodos son en principio de aplicación general para

emplearlos en situaciones no lineales y alejadas del equilibrio [49], en la práctica todas sus aplicaciones hasta ahora realizadas exigen sacrificar esta generalidad, resultando necesario introducir hipótesis *ad hoc* que linealicen las ecuaciones hidrodinámicas. Sin embargo, lo anterior no garantiza que el proceso sea sistemático y consistente con las restricciones impuestas por la termodinámica de procesos irreversibles [50]. Algunas de estas inconsistencias se han discutido con detalle en otras tesis doctorales [51].

En el caso cristales líquidos nemáticos, recientemente se han propuesto teorías hidrodinámicas fluctuantes [3], [52] basadas en la metodología que propusieron Landau y Lifshitz [5]. Sin embargo, este análisis de las fluctuaciones de las variables hidrodinámicas nemáticas no es preciso, pues no toma en cuenta la paridad respecto a inversiones temporales, por lo que la descripción de las mismas empleando el formalismo de Onsager-Machlup [9] estrictamente resultaría inadecuada. El marco teórico correcto mediante el cual debe hacerse el estudio, es a través de una teoría mucho más general, como la de procesos estocásticos gaussianos-markovianos propuesta por Fox y Uhlenbeck [6], [53]. La aplicación de este formalismo permitiría por una parte describir de una manera natural y sistemática a sistemas nemáticos cuyas variables no presentan la misma simetría de inversión temporal, y por otra, obtener de manera consistente sus relaciones de fluctuación-disipación empleando la metodología de Landau y Lifshitz [3], [52].

Se ha mencionado ya que un sistema isótropo como un fluido simple presenta procesos disipativos lentos, y asociados a éstos se tienen coeficientes de transporte [54]. En el caso de un sistema anisótropo como un cristal líquido nemático, en el cual la presencia del campo director produce un rompimiento de simetría, se tienen implicaciones diferentes e importantes en su comportamiento hidrodinámico, pues presenta coeficientes de transporte que reflejan dicha anisotropía, además de un nuevo par de modos hidrodinámicos, los cuales están asociados con las fluctuaciones o variaciones orientacionales del campo director.

A pesar de que un cristal líquido dispersa la luz en varios órdenes de magnitud más que un fluido ordinario [46], tanto desde el punto de vista teórico como experimental, los estudios correspondientes al comportamiento de las fluctuaciones en estos medios alrededor de estados estacionarios fuera del equilibrio son escasos. Desde el punto de vista teórico, y sólo para el caso de las variables hidrodinámicas transversales [55], se han realizado algunos estudios del comportamiento de las fluctuaciones orientacionales al analizar el efecto producido en el espectro de dispersión de luz de un nemático en estados estacionarios inducidos por la presencia de gradientes uniformes de temperatura [56] y por la acción de un flujo de corte [57]. En ambos casos se ha encontrado que el efecto de las fluctuaciones en el espectro de dispersión de luz es pequeño, siendo difícil de detectar experimentalmente. Por otra parte, hasta donde sabemos, no se ha realizado ningún estudio teórico sobre el comportamiento de las variables longitudinales de un nemático y mucho menos sobre su espectro de dispersión de luz, tanto en estados de equilibrio termodinámico como fuera de él. Éste es un tema abierto de investigación. Tampoco se han realizado análisis de estados estacionarios generados por otro tipo de gradientes externos en estos sistemas, con los que pudiera obtenerse efectos cualitativa y cuantitativamente mucho mayores que los reportados hasta ahora en la literatura para fluidos simples. Cabe mencionar que si bien se han realizado intentos preliminares para calcular los modos hidrodinámicos

transversales de un nemático [58], son escasos los estudios que involucren también a los correspondientes modos longitudinales [52], [59]. Desafortunadamente, se carece hasta ahora de un método claro y sistemático que permita deducir al conjunto de modos hidrodinámicos completo, transversales y longitudinales, de un cristal líquido nemático.

El objetivo principal del presente trabajo de investigación de tesis doctoral consta esencialmente de dos propósitos. El primero, consiste en formular una teoría hidrodinámica fluctuante para cristales líquidos nemáticos termótropos, de bajo peso molecular, misma a la que en lo sucesivo también denominaremos como nematodinámica fluctuante. El segundo, estriba en aplicar este formalismo teórico, al cálculo de los modos hidrodinámicos, el factor de estructura dinámico y el correspondiente espectro de dispersión de luz de estos sistemas, en un estado estacionario de no equilibrio producido por la presencia de un gradiente uniforme de temperatura y un campo gravitatorio constante (un sistema de Rayleigh-Bénard). Además, dicho formalismo también se emplea en la obtención del factor de estructura y el espectro de dispersión de luz de nemáticos, pero en un estado estacionario diferente ocasionado por la acción de un gradiente de presión externo.

Por cuestiones metodológicas, el cuerpo principal de la tesis se ha dividido en dos partes. En la primera, denominada *Hidrodinámica fluctuante de cristales líquidos nemáticos en el estado de equilibrio termodinámico*, se muestra la deducción de las ecuaciones hidrodinámicas de los cristales líquidos nemáticos (Capítulo 1), así como la formulación de la nematodinámica fluctuante (Capítulo 2). Asimismo, se hace un recuento de las principales fórmulas y configuraciones geométricas que son utilizadas en experimentos de dispersión de luz (Capítulo 3). En la segunda parte, titulada *Aplicaciones: Modos hidrodinámicos y espectros de dispersión de luz de un nemático en estados estacionarios de no equilibrio termodinámico*, se emplea este formalismo en el estudio de un sistema particular: una capa nemática confinada por dos placas horizontales paralelas expuesta primero a un gradiente uniforme de temperatura y a un campo gravitatorio constante, y posteriormente, a un gradiente de presión. Específicamente, para el primer estado estacionario de no equilibrio se calculan los modos hidrodinámicos del nemático (Capítulo 4) y su correspondiente espectro de dispersión de Rayleigh (Capítulo 5), en tanto que para el segundo, sólo se calcula dicho espectro (Capítulo 6).

A continuación se señala esquemáticamente el contenido de cada uno de los capítulos que integran esta tesis en los cuales puede apreciarse la forma en que se ha planeado el trabajo de investigación para llevar a cabo los propósitos anteriores.

En el Capítulo 1, se describen algunas de las principales características físicas de los cristales líquidos, enfatizando aquellas propiedades requeridas de los nemáticos termótropos de bajo peso molecular, tales como su naturaleza uniaxial, que modifica sustancialmente a la mayor parte de sus parámetros físicos. En particular, se pone énfasis en la descripción de su anisotropía dieléctrica, dado que jugará un papel fundamental en el análisis que se realizará posteriormente del espectro de dispersión de luz de un nemático. Además, se deducen con todo detalle de manera consistente y sistemática las ecuaciones de conservación y de balance de un nemático. Para ello se realiza una revisión, partiendo de la formulación tradicional estática y elástica que comúnmente se hace de los nemáticos, hasta llegar a una descripción más completa y

general de los mismos, basada en una teoría hidrodinámica ampliada, que toma en consideración argumentos fundamentales de simetrías y de la termodinámica de procesos fuera del equilibrio. Si bien se conocen en la actualidad distintas deducciones de las ecuaciones nemáticas, éstas se encuentran dispersas en una gran variedad de fuentes en la literatura. Este capítulo precisamente tiene como propósito proporcionar un resumen coherente y completo de estas descripciones nematodinámicas.

En el Capítulo 2, se discute la primera aportación original de este trabajo; a saber, se muestra que la nematodinámica fluctuante puede deducirse a partir de la teoría general de procesos estocásticos gaussianos formulada por Fox y Uhlenbeck [6]. Al aplicar este marco teórico a las ecuaciones nemáticas deducidas en el capítulo anterior, se calculan las ecuaciones hidrodinámicas fluctuantes linealizadas estocásticas, así como las relaciones de fluctuación-disipación de un nemático. Esto muestra que la nematodinámica fluctuante es un ejemplo, altamente no trivial, del formalismo de Fox y Uhlenbeck. Los resultados expuestos en este capítulo fueron publicados en la referencia [60].

El Capítulo 3 es una breve introducción a la dispersión de luz. Tiene como propósito precisar algunos de los conceptos y cantidades matemáticas que se emplearán en los capítulos 5 y 6. Aquí se discuten los aspectos generales de esta teoría, y en particular, la deducción del factor de estructura dinámico, que es la cantidad que regularmente se mide en este tipo de experimentos, así como las geometrías de dispersión más usuales. Además, se muestra la forma que adquiere el factor de estructura dinámico para el caso de los cristales líquidos nemáticos, se comentan algunas de las geometrías comúnmente utilizadas y se exhibe la forma típica que adquiere su espectro de dispersión de luz en el estado de equilibrio termodinámico.

En el Capítulo 4 se muestra la primera aplicación de la nematodinámica fluctuante, a saber, en el cálculo de los modos hidrodinámicos de un cristal líquido nemático en un estado estacionario determinado por el dispositivo experimental de Rayleigh-Bénard. El análisis se realiza sólo para el régimen no-convectivo. Para ello se introduce una nueva representación, es decir, un conjunto alternativo de variables de estado que toma en cuenta la asimetría que presentan tanto el campo de velocidades como el del director ocasionada por su acoplamiento mutuo. Mediante la observación de la matriz hidrodinámica del sistema de ecuaciones resultante en esta representación, se identifican claramente dos grupos de variables fluctuantes denominadas longitudinales y transversales, que están completamente desacopladas entre sí: cinco en el primero y dos en el segundo. Sendos grupos, dan lugar a sistemas de cinco y dos ecuaciones, respectivamente, desacoplados. De estas dos últimas ecuaciones se deducen dos modos hidrodinámicos transversales: uno debido a la orientación del director y otro de corte. El conjunto de las variables longitudinales a su vez puede separarse en dos conjuntos mutuamente independientes. El primero está integrado por dos variables cuya dinámica determina la existencia de los modos de propagación acústicos; en tanto que el segundo, formado por tres variables, da lugar a tres modos hidrodinámicos: uno relacionado con la orientación del director y dos más denominados visco-calóricos que resultan del acoplamiento de los modos difusivo térmico y de cizalla ocasionado por la presencia del gradiente térmico y el campo gravitacional. En total se encuentran siete modos hidrodinámicos nemáticos: cinco longitudinales y dos transversales.

Los modos visco-calóricos se escriben en términos del cociente R/R_c , en donde R es el número de Rayleigh y R_c es su valor crítico que se alcanza cuando se inicia la convección. De esta manera, si $R = 0$, es decir, en ausencia del gradiente térmico y el campo gravitacional, se reducen a aquellos correspondientes ya conocidos para un nemático en el estado de equilibrio termodinámico [3], [44], [52] y, al considerar el límite isótropo del nemático, a los de un fluido simple [1], [12], [61]. Cuando $R = R_c$ se obtienen las expresiones de los modos hidrodinámicos nemáticos cerca del valor crítico, las cuales se reducen, si se considera dicho límite, a las del fluido simple [62], [63], [64]. Además, dependiendo de los valores que tome el cociente R/R_c pueden ser propagativos, como también ocurre en el fluido simple [62], [63], [64], pero hasta donde sabemos, este último comportamiento no había sido predicho anteriormente para nemáticos.

Sin embargo, el par de modos visco-calóricos encontrado no coincide con los calculados en la literatura por otros investigadores, [65], [66], quienes, para una capa nemática en un estado estacionario fuera de equilibrio como el aquí utilizado, reportan un par diferente resultado del acoplamiento de los modos difusivo térmico y del director. Es importante mencionar que mediante estos últimos modos no es posible predecir la existencia de modos propagativos en el nemático, ni en el fluido simple al tomar el límite isótropo. Además, la forma que adquieren en este caso límite cuando $R = R_c$, no coincide con los reportes teóricos existentes [62], [63], [64]. Si bien nuestros modos visco-calóricos no coinciden con los reportados en la literatura para un cristal líquido nemático, su deducción representa la contribución más original de esta tesis, dado que las expresiones analíticas encontradas son más generales en el sentido siguiente: coinciden completamente con los modos ya conocidos en los casos límite señalados y, además, predicen la existencia de nuevos fenómenos, como la de dos modos propagativos visco-calóricos. Dado que en fluidos simples si ha sido predicha y verificada experimentalmente la existencia de este tipo de modos propagativos, nuestras predicciones sugieren la realización de nuevos experimentos en los que podrían corroborarse la existencia de estos modos. Los resultados expuestos en este capítulo fueron publicados en las referencias [67], [68].

El Capítulo 5 representa otra de las contribuciones originales de la tesis. En él se calcula $S(\vec{k}, \omega)$ para un nemático nuevamente en el estado estacionario determinado por el sistema de Rayleigh-Bénard mencionado para un tipo específico de geometría de dispersión. En particular, se obtiene el espectro de dispersión de Rayleigh el cual está dado completamente por el conjunto de tres variables longitudinales de las que se desprende el par de modos visco-calóricos señalado con anterioridad. Encontramos que el acoplamiento de estos modos ocasiona patrones novedosos en el espectro de dispersión del nemático. En el cálculo de este espectro se toman en consideración los siguientes tres casos: en el que sólo se tiene la presencia del campo gravitatorio constante, en el que únicamente actúa el gradiente de temperatura uniforme, y en el que ambas fuerzas externas actúan de manera combinada. Mostramos que los resultados obtenidos se reducen a las correspondientes expresiones conocidas para un nemático en el estado de equilibrio y para el fluido simple. Con la finalidad de comparar nuestras predicciones teóricas con el experimento, se calcula este espectro en las diferentes situaciones indicadas para el nemático termótropo MBBA; además, para el caso en el que sólo actúa el gradiente de temperatura, se encuentran las amplitudes de las componentes de no equilibrio

de las fluctuaciones, cantidades que se miden en experimentos para fluidos simples en estados fuera de equilibrio como el considerado. También se calcula la *función de dispersión intermedia* del nemático para decaimientos propagativos y difusivos de las fluctuaciones; en particular, para las segundas también se grafica su comportamiento. Los resultados mostrados aquí fueron publicados en la referencia [69]. Un estudio previo al expuesto en este capítulo fue publicado en la referencia [70].

En el Capítulo 6 se muestra la última de las contribuciones originales de la tesis. Allí se calcula $S(\vec{k}, \omega)$ para un nemático en un estado estacionario de no equilibrio producido por la presencia de un gradiente de presión externo. Este gradiente induce en el nemático un flujo de Poiseuille, con un perfil cuadrático en la velocidad. Esta situación física es novedosa y, dada la complejidad de los cálculos involucrados, sólo se calcula el espectro de dispersión de luz de las variables transversales del nemático; específicamente, se calcula este espectro para el nemático termótropo MBBA. En este caso, se encuentra que los efectos sobre el espectro de dispersión que produce el perfil estacionario de Poiseuille, cualitativa y cuantitativamente, son mucho mayores que cualesquiera de los que hasta ahora se han reportado teóricamente en la literatura para estos sistemas en cualquier situación fuera de equilibrio. En este sentido el análisis predice efectos que son susceptibles de comprobarse experimentalmente. Los resultados expuestos en este capítulo se publicaron en las referencias [60], [71].

Finalmente, se presentan las conclusiones que se desprenden del presente trabajo de investigación, poniendo énfasis en los aspectos relevantes del mismo, sus alcances, sus perspectivas y desde luego, sus limitaciones.

Parte I

Hidrodinámica fluctuante de cristales líquidos nemáticos en el estado de equilibrio termodinámico

Capítulo 1

Ecuaciones hidrodinámicas de un cristal líquido nemático

1.1. Introducción

Se han realizado numerosos intentos para formular teorías que describan las propiedades físicas de los cristales líquidos nemáticos. La mayor parte de dichas propiedades, tales como su flujo inusual y su respuesta a campos eléctricos y magnéticos, pueden ser estudiadas y descritas al considerar al cristal líquido como un medio continuo. El inicio de estos intentos se remonta a los trabajos de Oseen [72] y Zöcher [73], quienes desarrollaron una teoría estática, considerando que los cambios en las orientaciones moleculares del nemático ocurren en forma continua; dicha formulación resultó ser bastante exitosa, por ejemplo, en la descripción de la transición de Fredericks [74]. Más tarde Frank [75], realizó una revisión de los trabajos de Oseen basados en fuerzas de interacción intermoleculares aditivas y de corto alcance, y les dió una interpretación desde el punto de vista de la teoría de la elasticidad.

Las primeras descripciones dinámicas fueron realizadas por Anzellius [76] y Oseen [72]; pero una descripción global, basada en la formulación de ecuaciones generales de conservación y relaciones constitutivas del comportamiento mecánico del nemático, fue propuesta por Ericksen [45] y Leslie [44]. Tratamientos más recientes han permitido elaborar una descripción mucho más completa, al considerar una teoría hidrodinámica alternativa más general basada no sólo en ecuaciones de conservación y de balance, sino también en argumentos fundamentales de la termodinámica y de simetrías [2], [4], [54], [77], [78], [79], [80]. Precisamente a través de este enfoque, ha sido posible el estudio de otras fases líquido cristalinas más complejas como la esméctica y colestérica, así como los superfluidos, los sistemas magnéticos e inclusive los cristales mismos.

Existen otros métodos para deducir las ecuaciones macroscópicas de los cristales líquidos nemáticos. La mayor parte de ellos se basa en modelos sustentados en la mecánica de medios continuos que incorporan variables con las que se pueden describir algunos procesos disipativos. Sin embargo, dichas teorías carecen

de un marco termodinámico adecuado, pues la distinción que hacen entre procesos reversibles e irreversibles no es clara [81], [82], [83], [84], [85].

En este capítulo se empleará el método hidrodinámico mencionado con antelación, de manera que en la deducción de las ecuaciones nematodinámicas, se emplearán argumentos de simetría y de la termodinámica irreversible lineal. Entre las propiedades de simetría que se utilizarán, pueden mencionarse las de inversión temporal, de paridad espacial, la invariancia ante una transformación galileana e invariancia rotacional y traslacional. Desde el punto de vista de la termodinámica irreversible lineal, se considerará a un nemático como un medio continuo, con variables hidrodinámicas locales y que, además, se satisface la hipótesis de equilibrio local.

1.2. Cristales líquidos

Los cristales líquidos se caracterizan por ser un estado de agregación intermedio entre las fases sólido cristalina y líquida [47]. Constituyen otro estado de la materia¹, es decir, son verdaderas fases termodinámicas (denominadas mesofases) [46], [89], [90], [91]. Miles de compuestos orgánicos pueden presentar estas fases.

La mesofase líquido cristalina presenta la particularidad de que su orden posicional se ha reducido notablemente con respecto a la fase sólida, o prácticamente ha desaparecido, mientras que posee orden orientacional en algún grado. Esta cualidad crucial, constituye un requerimiento esencial para que existan las propiedades físicas tan peculiares que la distinguen [47].

Las moléculas que propician la formación de cristales líquidos, muestran las siguientes características fundamentales: una alta anisotropía y una polarización permanente o inducida. Estas moléculas pueden presentar una forma alargada como barra (calamítica), o inclusive contar con una estructura molecular plana en forma de disco (discótica) [47], [91], [92]. Las dimensiones típicas de las longitudes de este tipo de estructuras son de algunas decenas de angstroms². Existen otros dos tipos de moléculas que dan origen a los cristales líquidos: las amfifílicas, al mezclarse con algún solvente, así como las que forman monómeros y dan lugar a cristales líquidos poliméricos [47], [88], [93]. Todas las propiedades físicas de los cristales líquidos están determinadas por las características de los grupos químicos que constituyen sus moléculas y por la forma en que fueron sintetizados, lo cual determina, por ejemplo, sus permitividades eléctricas o el número y tipo de mesofases que presentan.

Dependiendo de su estructura molecular, los cristales líquidos pueden poseer una o más mesofases antes de transformarse en un líquido isotrópico o en un sólido cristalino. Las transiciones de estos estados intermedios pueden producirse, ya sea por medio de variaciones en la temperatura, o por la influencia de solventes. Dada la dependencia que presentan con respecto a estos parámetros físicos, se clasifican como: termótropos si sus cambios de fase están gobernados por la temperatura, o liótropos, si dichos cambios dependen de sus

¹Una descripción interesante del proceso histórico está dada por Kelker [86], Gray [87] y Collings [88].

²Por ejemplo, las moléculas del nemático PAA tienen aproximadamente una longitud de 20Å y un ancho de 5Å [46].

concentraciones al mezclarse con algún solvente [47], [88], [93]; no obstante, se amplía esta clasificación al incorporar a los poliméricos, que de igual forma presentan fases líquido cristalinas [88]. Los cristales líquidos termótrópos son los cristales líquidos más ampliamente utilizados y extensamente estudiados. Exhiben varias fases termotrópicas. Si bien la forma real de sus moléculas es bastante complicada, en una muy buena aproximación puede considerársele como calamítica o discótica; los calamíticos son los más comunes y los más conocidos³. Sus moléculas al interactuar entre sí, dan lugar a estructuras ordenadas que pueden clasificarse en términos generales en tres tipos: nemáticos, esmécticos y colestéricos [94].

Los cristales líquidos igualmente pueden clasificarse por sus propiedades de simetría. Los líquidos convencionales son invariantes ante transformaciones de grupos de simetría de rotación y de traslación, de modo que el grupo de simetría de estos sistemas es $O(3) \times T(3)$. Al descender la temperatura, generalmente se produce un rompimiento espontáneo de la simetría traslacional $T(3)$, dando lugar a la transición del estado líquido al sólido. Si el líquido está constituido por moléculas anisótropas, cuando la temperatura disminuye, puede observarse primero un rompimiento de la simetría orientacional $O(3)$, teniéndose como resultando la formación del cristal líquido; si la invariancia traslacional $T(3)$ aún perdura, se tendrá un cristal líquido nemático. Si la temperatura continúa disminuyendo, la fuerte anisotropía de las moléculas líquido cristalinas harán que $T(3)$ se rompa sólo parcialmente, hasta que eventualmente lo haga por completo, produciéndose como consecuencia la solidificación. Las fases que presentan simetría traslacional $T(2)$ se denominan esmécticas, y las que presentan la simetría $T(1)$, columnares. En la transición del estado líquido a la mesofase nemática, generalmente el grupo de rotaciones $O(3)$ se reemplaza para nemáticos convencionales por un grupo de simetría uniaxial $D_{\infty h}$.

1.2.1. Parámetro de orden y vector director

Las moléculas de un cristal líquido muestran una enorme tendencia para mantener una dirección preferencial promedio y el grado en el que están dispuestas se cuantifica mediante el parámetro de orden. Un primer intento de cuantificación considera, por simplicidad, que las moléculas líquido cristalinas tienen la forma de una barra alargada y son completamente rígidas [95]. De esta manera podemos asociar un vector unitario \hat{v}^i sobre el eje largo de simetría de la i -ésima molécula para describir la orientación de ésta. Debido a que los cristales líquidos poseen centro de simetría, el promedio de los \hat{v}^i se anula; por consiguiente, resulta inconveniente introducir un parámetro de orden vectorial en cristales líquidos análogamente a la forma en que se hace para describir el proceso de magnetización en un ferromagneto, por lo que se consideran armónicos de orden superior o tensores. Un parámetro de orden que puede proponerse de manera natural, para describir el orden en los nemáticos o los colestéricos, es el tensor de segundo orden

$$\bar{S}_{\alpha\beta}(\vec{r}) = \frac{1}{N} \sum_i \left(\nu_{\alpha}^i \nu_{\beta}^i - \frac{1}{3} \delta_{\alpha\beta} \right), \quad (1.1)$$

³Existen cerca de 20,000 compuestos de esta clase, 15,000 de los cuales están compilados en tablas [91].

en donde la suma se realiza sobre las N moléculas que conforman un volumen pequeño del medio nemático localizado en el punto \vec{r} y ν_α representa una componente de $\widehat{\nu}$ referida a un sistema coordinado de laboratorio de ejes fijos y donde $\delta_{\alpha\beta}$ es una delta de Kronecker. Este parámetro de orden es un tensor simétrico sin traza con cinco componentes independientes. Si el nemático se encuentra en su fase isotrópica, en la que sus moléculas poseen orientaciones aleatorias, entonces $\overline{S}_{\alpha\beta}$ se anula⁴.

Ahora bien, con la finalidad de construir un parámetro de orden para moléculas rígidas no lineales (aquellas cuyos átomos no están colocados sobre un eje largo de simetría bien definido respecto al cual pueden girar), se introduce un sistema de coordenado cartesiano $x'y'z'$ fijo en las moléculas. De esta manera, si el cristal líquido es uniaxial, el parámetro de orden tensorial se define [96] en la forma

$$\overline{S}_{\alpha'\beta'}(\vec{r}) = \left\langle \cos\theta_{\alpha'} \cos\theta_{\beta'} - \frac{1}{3}\delta_{\alpha'\beta'} \right\rangle, \quad (1.2)$$

en donde $\cos\theta_{\alpha'}$ es el ángulo entre el eje molecular α' y la dirección preferencial o eje óptico, y el paréntesis angular representa el promedio de las moléculas realizado en un volumen pequeño, tal como se supuso al proponer (1.1). En el caso en que las moléculas sean lineales, las dos parámetros (1.1) y (1.2) son equivalentes. El parámetro (1.2) resulta de gran utilidad en la interpretación del espectro de resonancia magnética nuclear de nemáticos [95].

Si las moléculas son flexibles, en diferentes partes tendrían distintos tensores $\overline{S}_{\alpha\beta}$ lo cual complicaría enormemente la descripción. Con el propósito de evitar esta dificultad, de Gennes [97] propuso cuantificar el orden orientacional en términos de una propiedad macroscópica del sistema, que sea independiente de cualquier suposición respecto a la rigidez de las moléculas, lo cual también es conveniente desde el punto de vista termodinámico. La propiedad macroscópica seleccionada por de Gennes es la anisotropía en la susceptibilidad diamagnética⁵ De este modo, puede definirse⁶

$$\overline{Q}_{\alpha\beta} = \overline{\chi}_{\alpha\beta} - \frac{1}{3}\delta_{\alpha\beta}\overline{\chi}_{\gamma\gamma}, \quad (1.3)$$

en donde $\overline{\chi}_{\alpha\beta}$ es el tensor de susceptibilidad magnética volumétrica. De nueva cuenta, $\overline{Q}_{\alpha\beta}$ es un tensor simétrico sin traza de rango dos que posee cinco componentes independientes. Debido a que las interacciones magnéticas entre las moléculas son pequeñas, la susceptibilidad es aproximadamente la suma de las susceptibilidades individuales de las moléculas, y $\overline{Q}_{\alpha\beta}$ puede relacionarse directamente con $\overline{S}_{\alpha\beta}$ si las moléculas son rígidas [95]. En principio, cualquier otra propiedad puede ser usada para definir una expresión equivalente a (1.3), por ejemplo, la susceptibilidad eléctrica; sin embargo, la susceptibilidad eléctrica no puede considerarse

⁴Estrictamente $\overline{S}_{\alpha\beta}$ es igual a cero solamente cuando se toma el límite termodinámico de la ecuación (1.1), de lo contrario, se tiene la presencia de cierto orden orientacional de corto alcance en la fase isotrópica de un nemático.

⁵Se denomina susceptibilidad magnética volumétrica $\overline{\chi}$, a la constante de proporcionalidad adimensional que cuantifica el grado de magnetización \vec{M} que adquiere un material (o momento magnético por unidad de volumen) cuando se le somete a un campo magnético \vec{H} , es decir, $\vec{M} = \overline{\chi}\vec{H}$. Si $\overline{\chi} < 0$, el material es diamagnético y repele el campo magnético.

⁶Aquí se ha utilizado la notación de Einstein para índices repetidos. En toda la tesis con frecuencia se seguirá esta convención.

como la suma de las susceptibilidades eléctricas de las moléculas individuales, dado que las correcciones a nivel local del campo son mucho más importantes en el caso eléctrico.

Para tomar en cuenta la geometría y la dinámica del eje preferencial, a la alineación promedio de las moléculas se le representa por medio de un vector \vec{n} denominado director que por convención se considera unitario. El vector director se distorsiona fácilmente por la presencia de campos eléctricos y magnéticos, así como por las superficies de los recipientes que contienen a los cristales líquidos si éstas han sido preparadas adecuadamente [46].

1.3. Nemáticos

El presente trabajo de investigación está enfocado al estudio de los nemáticos termótropos de bajo peso molecular cuyas características más representativas son:

a) Los centros de masa de sus moléculas no presentan orden posicional de largo alcance, de manera que su espectro de dispersión de rayos X no muestra picos de Bragg. Además, éstas pueden moverse lateralmente, girar alrededor del eje común o deslizarse paralelamente a él, característica que le permite al nemático fluir de forma similar a un líquido ordinario isótropo⁷.

b) Presentan orden de largo alcance en la orientación de sus moléculas, es decir, los ejes largos⁸ de sus moléculas tienden a alinearse en una dirección preferencial representada por \vec{n} . Esto les confiere propiedades ópticas uniaxiales propias de los cristales sólidos.

c) La orientación espacial de \vec{n} es arbitraria, pero su dirección se impone a través de las superficies que contienen al nemático o mediante la aplicación de campos magnéticos o eléctricos externos.

d) La orientación del director no distingue entre las direcciones \vec{n} y $-\vec{n}$ (simetría nemática).

e) Las fases nemáticas sólo se producen en materiales que no distinguen entre derecha e izquierda (simetría especular).

Desde un punto de vista cristalográfico, las propiedades b), d) y e) se resumen mediante el símbolo $D_{\infty h}$. Una representación esquemática del orden que presentan las moléculas en un nemático se muestra en la Figura 1.1.

Es importante señalar que un cristal líquido nemático termótropo existe dentro del intervalo específico de temperaturas, $T_m < T < T_c$, en donde T_m es la temperatura a la que un sólido se funde en un nemático y T_c la temperatura de aclaramiento, que ocurre cuando el nemático se transforma en un líquido isótropo. En el sólido, los centros de gravedad de las moléculas cuentan con orden posicional de largo alcance y, al estar éstas orientadas en una dirección promedio, además poseen orden orientacional de largo alcance. Cuando

⁷Para un nemático típico tal como el PAA, la viscosidad es del orden de 0.1 poise, mientras que la del agua a temperatura ambiente es del orden de 10^{-2} poise.

⁸Se considera como eje largo de una molécula, aquel que pasa por sus extremos y respecto al cual presenta su menor momento de inercia al girar.

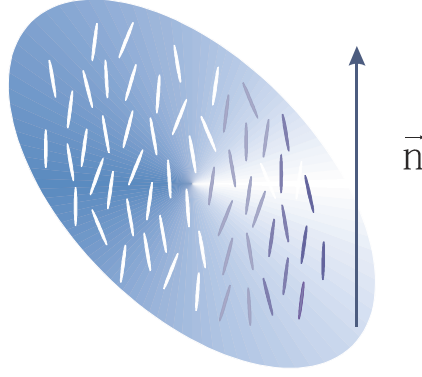


Figura 1.1: Representación de la orientación promedio de las moléculas de un cristal líquido nemático por medio del vector director \vec{n} .

el sólido se funde en la mesofase nemática a la temperatura T_m pierde su orden posicional, pero en ella prevalece cierto orden orientacional en los ejes largos de sus moléculas. A una temperatura mayor T_c , esta mesofase da lugar a un líquido isótropo que carece de orden tanto posicional como orientacional.

1.3.1. Simetría uniaxial

Dado que las moléculas de un cristal líquido nemático se encuentran alineadas a lo largo del vector director, presentan simetría uniaxial⁹; por consiguiente, el parámetro de orden (1.1) puede expresarse en términos de \vec{n} como [95]

$$\bar{S}_{\alpha\beta}(\vec{r}) = \bar{S} \left(n_\alpha n_\beta - \frac{1}{3} \delta_{\alpha\beta} \right), \quad (1.4)$$

en donde n_α es la componente de \vec{n} en un sistema coordenado de laboratorio fijo y \bar{S} es el parámetro de orden escalar

$$\bar{S} = \int_0^\pi \left(1 - \frac{2}{3} \sin^2 \theta \right) f(\theta) \sin \theta d\theta, \quad (1.5)$$

que mide el grado de alineamiento de las moléculas. Aquí $f(\theta) \sin \theta d\theta$ es la fracción de moléculas cuyos ejes se encuentran entre los ángulos θ y $\theta + d\theta$ respecto a la dirección preferencial. La magnitud de \bar{S} está comprendida por el intervalo $0 < \bar{S} < 1$; en la fase isótropa $\bar{S} = 0$, mientras $\bar{S} = 1$ corresponde a la situación en la que todas las moléculas se encuentran perfectamente alineadas.

Por otra parte, en presencia de una simetría uniaxial, el parámetro de orden tensorial (1.3) toma la forma

$$\bar{Q}_{\alpha\beta} = \bar{Q} \left(n_\alpha n_\beta - \frac{1}{3} \delta_{\alpha\beta} \right), \quad (1.6)$$

en donde el módulo $\bar{Q} \equiv \bar{\chi}_{\parallel} - \bar{\chi}_{\perp}$ es el parámetro de orden escalar que cuantifica la anisotropía de la susceptibilidad magnética, siendo $\bar{\chi}_{\parallel}$ y $\bar{\chi}_{\perp}$, respectivamente, las susceptibilidades paralela y perpendicular al eje de simetría. El parámetro de orden definido por (1.6) es un promedio sobre todo el sistema, de manera

⁹Pueden presentar simetría biaxial también, dando lugar a la presencia de dos ejes ópticos.

que proporciona una medida del orden orientacional de largo alcance de las moléculas del cristal líquido. Mientras mayor sea el alineamiento de los ejes de las mismas con respecto al vector director, más cercano a la unidad será el valor de \overline{Q} y, por otra parte, si éste es cada vez menor, \overline{Q} llegará a anularse como ocurre en los líquidos isotrópicos. Además, los cristales líquidos presentan orden orientacional de corto alcance y a distancias cortas sus moléculas están correlacionadas mediante interacciones moleculares.

1.3.1.1. Anisotropía dieléctrica

La simetría uniaxial que presenta un nemático hace que la mayor parte de sus propiedades físicas sean anisótropas. Por ejemplo, el acoplamiento de un campo eléctrico externo con un dieléctrico nemático ideal podría distorsionar el alineamiento de sus moléculas, dado que una distorsión adecuada implicará una polarización dieléctrica paralela al campo¹⁰ [98], [99], [100], y además, su coeficiente dieléctrico presenta una anisotropía que permite descomponerlo en los coeficientes dieléctricos estáticos paralelo ϵ_{\parallel} y perpendicular ϵ_{\perp} respecto a la dirección de \vec{n} . En este caso la relación más general entre el campo de desplazamiento \vec{D} y el campo eléctrico \vec{E} , está dada por [46]

$$D_{\alpha} = \epsilon_{\alpha\beta} E_{\beta}, \quad (1.7)$$

en donde

$$\epsilon_{\alpha\beta} = \epsilon_{\perp} \delta_{\alpha\beta} + \epsilon_a n_{\alpha} n_{\beta}, \quad (1.8)$$

es el tensor dieléctrico, siendo $\epsilon_a \equiv \epsilon_{\parallel} - \epsilon_{\perp}$ la anisotropía dieléctrica que puede ser positiva o negativa, dependiendo de la estructura química de sus moléculas. Si cada molécula posee un momento dipolar permanente prácticamente paralelo a su eje largo, el dipolo puede orientarse eficientemente por un campo eléctrico \vec{E} a lo largo del eje del nemático. Por otra parte, si \vec{E} es normal a \vec{n} , se tendrá que $\epsilon_{\parallel} > \epsilon_{\perp}$. Si se tiene un momento dipolar permanente, aproximadamente normal al eje largo de las moléculas, la situación se invierte, y $\epsilon_{\parallel} < \epsilon_{\perp}$. La anisotropía dieléctrica en principio brinda un método para alinear con torcas a las moléculas de un nemático mediante la aplicación de un campo eléctrico externo.

1.3.2. Deformaciones elásticas

Para la mayoría de las situaciones de interés, las distancias l para las cuales ocurren variaciones significativas del parámetro de orden son mucho mayores (típicamente $l \geq 1 \mu m$) que las dimensiones a de sus moléculas (comúnmente $a \sim 20 \text{ \AA}$); por consiguiente, las deformaciones en el nemático pueden estudiarse por medio de una teoría de medios continuos. Si al nemático rígido ideal se le distorsiona débilmente ($l/a \gg 1$) en cualquier punto, sus propiedades ópticas locales serán aún uniaxiales y la magnitud de su anisotropía (determinada por el parámetro de orden) permanecerá invariante. De este modo, n_i será una función de la

¹⁰Inversamente, una deformación producida en un nemático puede inducir una polarización. Este fenómeno se conoce como efecto flexoeléctrico.

posición \vec{r} a nivel local, $n_i = n_i(\vec{r})$ y

$$Q_{ij}(\vec{r}) \simeq \bar{Q}(T) \left[n_i(\vec{r}) n_j(\vec{r}) - \frac{1}{3} \delta_{ij} \right], \quad (1.9)$$

en donde en general \bar{Q} es función de la temperatura T . Por consiguiente, el estado de distorsión puede describirse completamente en términos del campo vectorial director $n_i(\vec{r})$.

Resulta posible construir una descripción elástica que las variaciones espaciales de $n_i(\vec{r})$ producidas por distorsiones elásticas en el nemático cuando son pequeñas a escala molecular,

$$a \nabla \vec{n} \ll 1,$$

(con magnitud¹¹ $|a \nabla \vec{n}| \sim a/l \ll 1$, para \vec{n} unitario). Esto no significa que necesariamente la dirección de n_i sea la misma en cada punto del nemático.

1.3.3. Descripción termodinámica

Considérese una porción de nemático sin fluir, de forma arbitraria y de volumen V cuyas partículas siempre son las mismas, de manera que puede ser considerada como un sistema termodinámico cerrado. Como se ha supuesto que se cumple la hipótesis de equilibrio local, la primer ley de la termodinámica (que relaciona los cambios en de la energía interna dU del sistema con los de la entropía dS y el trabajo dW), está dada como [59], [101]

$$dU = TdS + dW. \quad (1.10)$$

El trabajo termodinámico generalizado dW o energía asociada durante la deformación (cuasiestática), está dado por

$$dW = \sigma_{ik} d\bar{u}_{ik}. \quad (1.11)$$

Aquí $d\bar{u}_{ik}$ son los cambios del tensor de deformaciones \bar{u}_{ik} causados por su interacción con fuerzas externas ejercidas por los alrededores, las cuales se representan por el tensor de esfuerzos

$$\sigma_{ik} = -p\delta_{ik} + \tau_{ik}, \quad (1.12)$$

en donde p es la presión constante que, en ausencia de deformaciones, experimenta la porción del nemático en cada punto debido a la compresión hidrostática; mientras que τ_{ik} representa las fuerzas externas que producen las deformaciones elásticas en el medio¹² [59]. Entonces

¹¹ Aquí $\nabla \equiv \partial_x \hat{x} + \partial_y \hat{y} + \partial_z \hat{z}$ denota al operador diferencial nabla o gradiente, en donde $\partial_j \equiv \partial/\partial x_j$ y $\hat{x}, \hat{y}, \hat{z}$ son los vectores unitarios en las direcciones de los ejes x, y, z , respectivamente.

¹² Al final de esta sección se da más información respecto a la forma del tensor τ_{ik} ; allí se determinan los valores de las variables del nemático cuando alcanza el estado de equilibrio una vez concluido el proceso de deformación elástica. En la Sección 1.4, se señala que τ_{ik} también debe incluir los efectos reversibles e irreversibles del flujo nemático, mismos que se precisan en las secciones 1.6 y 1.7.

$$dW = -pdV + \tau_{ik}d\bar{u}_{ik} \quad (1.13)$$

y

$$dU = TdS - pdV + \tau_{ik}d\bar{u}_{ik}. \quad (1.14)$$

Dado que las variables independientes en (1.14) son S , V , \bar{u}_{ik} , podemos considerar $U = U(S, V, \bar{u}_{ik})$. Como U debe ser una función homogénea de primer orden [102], $U(S, V, \bar{u}_{ik}) = VU(\sigma, 1, u_{ik})$, en donde $\sigma \equiv S/V$ y $u_{ik} \equiv \bar{u}_{ik}/V$. Obsérvese que $U(\sigma, 1, u_{ik})$ es la densidad volumétrica de energía interna de la porción del fluido, que denotaremos como $\mathcal{U}(\sigma, u_{ik}) \equiv U(\sigma, 1, u_{ik})$. Derivando respecto de V la propiedad de homogeneidad de U , se obtiene la relación de Euler [102]

$$\mathcal{U}(\sigma, u_{ik}) = T\sigma - p + \tau_{ik}u_{ik} \quad (1.15)$$

en donde $(\partial U/\partial S)_{V, \bar{u}_{ik}} = T$, $(\partial U/\partial V)_{S, \bar{u}_{ik}} = -p$ y $(\partial U/\partial \bar{u}_{ik})_{S, V} = \tau_{ik}$. De (1.15) directamente se obtiene

$$U(S, V, \bar{u}_{ik}) = TS - pV + \tau_{ik}\bar{u}_{ik}. \quad (1.16)$$

De acuerdo con los resultados anteriores, la forma diferencial de (1.15) queda dada por

$$d\mathcal{U} = Td\sigma + \tau_{ik}du_{ik}. \quad (1.17)$$

Por ser la porción de fluido considerada un sistema cerrado, emplearemos como potencial termodinámico a la energía libre de Helmholtz $F = U - TS$. De esta manera, al considerar (1.14), la forma diferencial de este potencial es

$$dF = -SdT - pdV + \tau_{ik}d\bar{u}_{ik}; \quad (1.18)$$

o en términos de variables intensivas, si definimos a la densidad volumétrica de energía libre de Helmholtz como $\mathcal{F} = F/V$, al tomar en cuenta (1.17), se obtiene

$$d\mathcal{F} = -\sigma dT + \tau_{ik}du_{ik}. \quad (1.19)$$

1.3.3.1. Desplazamientos y fuerzas generalizados para un medio nemático

En el estado de equilibrio termodinámico, un nemático, en reposo y en ausencia de fuerzas externas, es homogéneo con el campo director n_i constante en todo su volumen. No obstante, cuando se le somete a una deformación ligera, n_i experimenta cambios espaciales pequeños en su dirección; es decir, las dimensiones características de la deformación son mucho mayores a las dimensiones moleculares, de manera que las derivadas $\partial n_i/\partial x_j$ ($= \partial_j n_i$) pueden considerarse como cantidades pequeñas. Por consiguiente, en un nemático, los desplazamientos generalizados por unidad de volumen du_{ik} producidos durante el trabajo asociado con la variación de la energía de distorsión elástica que experimenta el campo director n_i , deben estar relacionados con los gradientes de éste. Supondremos que el proceso de deformación elástica ocurre muy lentamente, de modo que la porción de fluido nemático se encuentra en equilibrio termodinámico en todo

instante, esto es, que el proceso es reversible. Así, tendrá sentido considerar a los gradientes del director como variables termodinámicas extensivas y poder escribir a la densidad volumétrica de energía libre de Helmholtz en la forma $\mathcal{F} = \mathcal{F}(T, \partial_j n_i)$. A menos que se indique lo contrario, en lo sucesivo relacionaremos todas las cantidades termodinámicas al volumen unitario del cuerpo deformado.

Durante la deformación las distorsiones elásticas son cuasiestáticas y sin fricción, por lo que los efectos disipativos inherentes son nulos y las deformaciones elásticas son isotérmicas. En dicho proceso escribiremos a la densidad de energía libre de Helmholtz como $\mathcal{F}_d = \mathcal{F}_d(\partial_j n_i)$, en donde el subíndice d indica el estado distorsionado. De esta manera, la densidad de energía libre \mathcal{F} puede escribirse como

$$\mathcal{F}(T, \partial_j n_i) = \mathcal{F}_0(T) + \mathcal{F}_d(\partial_j n_i), \quad (1.20)$$

siendo $\mathcal{F}_0(T)$ la energía libre del sistema no distorsionado (denotada con el subíndice 0). Cabe señalar que \mathcal{F}_d debe anularse si $\partial_j n_i = 0$. De acuerdo con lo anterior, resulta posible escribir a la densidad volumétrica de energía interna como

$$\mathcal{U}(\sigma, \partial_j n_i) = \mathcal{U}_0(\sigma) + \mathcal{U}_d(\partial_j n_i). \quad (1.21)$$

La comparación de (1.20) con (1.19) permite identificar que $d\mathcal{F}_0(T) = -\sigma dT$ y $d\mathcal{F}_d(\partial_j n_i) = \tau_{ik} du_{ik}$. Análogamente, al equiparar (1.21) con (1.17), se encuentra que $d\mathcal{U}_0(\sigma) = T d\sigma$ y $d\mathcal{U}_d(\partial_j n_i) = \tau_{ik} du_{ik}$.

Aún falta determinar la forma explícita de $\mathcal{F}_d(\partial_j n_i)$ y por ende, las fuerzas generalizadas τ_{ij} . Dado que el nemático experimenta una distorsión elástica débil, de manera que se encuentra ligeramente alejado de su estado de no distorsión, $\mathcal{F}_d(\partial_j n_i)$ puede escribirse como

$$\mathcal{F}_d = \mathcal{F} - \mathcal{F}_0 = \frac{\partial \mathcal{F}}{\partial (\partial_k n_i)} \delta (\partial_k n_i) + \frac{1}{2!} \frac{\partial^2 \mathcal{F}}{\partial (\partial_k n_i) \partial (\partial_j n_l)} \delta (\partial_k n_i) \delta (\partial_j n_l), \quad (1.22)$$

en donde $\delta (\partial_k n_i)$ denota las desviaciones que experimenta la variable $\partial_j n_i$ durante el proceso de deformación, en relación al estado no deformado. Para precisar la forma de \mathcal{F}_d , deben hacerse las siguientes consideraciones [46], [95]: 1) \mathcal{F}_d debe ser una función par respecto a n_i , dado que los estados n_i y $-n_i$ son indistinguibles. 2) Los únicos términos lineales en $\partial_j n_i$ que son invariantes bajo rotaciones son: $\nabla \cdot \vec{n}$, que es descartado por la primera condición; $\vec{n} \cdot \nabla \times \vec{n}$, que cambia de signo debido a las transformaciones, $x \rightarrow -x$, $y \rightarrow -y$ y $z \rightarrow -z$, y por lo tanto está prohibido en un material centrosimétrico. 3) Aquellos términos en \mathcal{F}_d de la forma $\nabla \cdot \vec{u}$, en donde $\vec{u}(\vec{r})$ es un campo vectorial arbitrario, pueden descartarse si sólo se consideran las contribuciones volumétricas y no las superficiales.

Para determinar los términos de orden $(\partial_j n_i)^2$ presentes en \mathcal{F}_d , consideremos explícitamente las derivadas espaciales de n_i , las cuales constituyen el tensor de rango dos $\partial_j n_i$. Como es usual, resulta conveniente separar este tensor en sus partes simétrica

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

y antisimétrica, relacionada con el rotacional de \vec{n}

$$(\nabla \times \vec{n})_k = \epsilon_{klm} \partial_l n_m,$$

en donde ϵ_{klm} es el tensor de Levi-Civita. En general, un tensor simétrico $e_{\alpha\beta}$ posee seis componentes independientes, las cuales en este caso están restringidas por el hecho de que \vec{n} es un vector unitario; además, puede expresarse de manera más conveniente al considerar un sistema de referencia local (ortogonal) con el eje z en la dirección de \vec{n} . En consecuencia, todos los gradientes de n_z son cero (debido a que $|\vec{n}| = 1$) y $e_{zz} = 0$, $e_{zx} = \frac{1}{2}(\nabla \times \vec{n})_y$, $e_{zy} = -\frac{1}{2}(\nabla \times \vec{n})_x$; también resulta útil considerar que $e_{xx} + e_{yy} + e_{zz} = e_{xx} + e_{yy} = \nabla \cdot \vec{n}$. De la condición 1), \mathcal{F}_d debe ser una función cuadrática de las componentes de $e_{\alpha\beta}$ y $\nabla \times \vec{n}$. Puede considerarse que \mathcal{F}_d está dada como la suma de términos cuadráticos en $e_{\alpha\beta}$, en $\nabla \cdot \vec{n}$ y los que surgen de la combinación de ambas cantidades. Así, para hallar los primeros, formalmente se procede de manera equivalente a la de encontrar el número de constantes elásticas en un medio de simetría C_∞ alrededor del eje z . De acuerdo con la teoría de elasticidad, para este caso la expresión más general está dada por [46] $\varrho_1 e_{zz}^2 + \varrho_2 (e_{xx} + e_{yy})^2 + \varrho_3 e_{\alpha\beta} e_{\beta\alpha} + \varrho_4 e_{zz} (e_{xx} + e_{yy}) + \varrho_5 (e_{zx}^2 + e_{zy}^2)$, la cual involucra a cinco constantes arbitrarias ϱ_i (con $i = 1 \dots 5$). Esta expresión puede reescribirse como

$$(\varrho_2 + \varrho_3) (\nabla \cdot \vec{n})^2 + \frac{\varrho_3}{2} (\vec{n} \cdot \nabla \times \vec{n})^2 + \frac{1}{2} \left(\varrho_3 + \frac{\varrho_5}{2} \right) (\vec{n} \times \nabla \times \vec{n})^2. \quad (1.23)$$

En la deducción de (1.23) se han considerado las formas explícitas de e_{zz} , e_{zx} y e_{zy} señaladas con anterioridad, la identidad $e_{\alpha\beta} e_{\beta\alpha} = (\nabla \cdot \vec{n})^2 + \partial_\alpha (n_\beta \partial_\beta n_\alpha) - \partial_\beta (n_\beta \partial_\alpha n_\alpha) + \frac{1}{2} (\nabla \times \vec{n})^2$, cuyos términos segundo y tercero pueden ignorarse debido a la condición 3), y que $(\nabla \times \vec{n})^2 \equiv (\vec{n} \cdot \nabla \times \vec{n})^2 + (\vec{n} \times \nabla \times \vec{n})^2$.

Considerando ahora las contribuciones a \mathcal{F}_d de los términos cuadráticos de $\nabla \cdot \vec{n}$, en un medio con simetría C_∞ deben tener la estructura $\iota_1 (\nabla \times \vec{n})_z^2 + \iota_2 \left[(\nabla \times \vec{n})_x^2 + (\nabla \times \vec{n})_y^2 \right]$, que puede abreviarse como

$$\iota_1 (\vec{n} \cdot \nabla \times \vec{n})^2 + \iota_3 (\vec{n} \times \nabla \times \vec{n})^2. \quad (1.24)$$

De las aportaciones a \mathcal{F}_d debidas a términos provenientes de la combinación de $e_{\alpha\beta}$ y $\nabla \cdot \vec{n}$, el único lineal en $(\nabla \times \vec{n})_z$ compatible con la simetría C_∞ es $(\nabla \times \vec{n})_z (e_{xx} + e_{yy}) = (\vec{n} \cdot \nabla \times \vec{n}) \nabla \cdot \vec{n}$. Dado que éste es impar en \vec{n} , de acuerdo con la condición 2), debe ser ignorado. Los únicos términos lineales en $(\nabla \times \vec{n})_x$ y $(\nabla \times \vec{n})_y$ compatibles con la simetría C_∞ son $(\nabla \times \vec{n})_x = (\nabla \times \vec{n})_x e_{xz} + (\nabla \times \vec{n})_y e_{yz} = 0$ (debido a la formas explícitas de e_{zz} , e_{zx} y e_{zy} mencionadas anteriormente) y $(\nabla \times \vec{n})_y e_{zx} - (\nabla \times \vec{n})_x e_{zy} = \frac{1}{2} (\vec{n} \times \nabla \times \vec{n})^2$. De esta manera, la forma más general para este tercer caso es

$$\vartheta (\vec{n} \times \nabla \times \vec{n})^2. \quad (1.25)$$

Finalmente, al reagrupar las expresiones (1.23), (1.24) y (1.25), puede escribirse a la densidad de energía libre del sistema distorsionado en la forma [46], [47], [52], [59], [95]

$$\mathcal{F}_d = \frac{1}{2} K_1 (\nabla \cdot \vec{n})^2 + \frac{1}{2} K_2 (\vec{n} \cdot \nabla \times \vec{n})^2 + \frac{1}{2} K_3 (\vec{n} \times \nabla \times \vec{n})^2, \quad (1.26)$$

expresión que recibe el nombre de energía libre de distorsión de Oseen-Frank [75], [103] y resulta ser la fórmula fundamental de la teoría elástica de nemáticos. En (1.26) las K_i ($i = 1, 2, 3$) reciben el nombre de coeficientes elásticos de Frank y están asociados, respectivamente, con los tres tipos básicos de deformaciones señalados con anterioridad: K_1 con $\nabla \cdot \vec{n} \neq 0$ (splay o divergente), K_2 con $\vec{n} \cdot \nabla \times \vec{n} \neq 0$ (twist o torsión)

y K_3 con $\vec{n} \times \nabla \times \vec{n} \neq 0$ (bend o flexión). Desde luego, en toda deformación que experimente un nemático, están presentes simultáneamente los tres tipos; no obstante, también es posible generar en éste deformaciones que sean únicamente splay, twist o bend. Para que el estado de deformación sea estable, se requiere que los coeficientes K_1 , K_2 y K_3 (que en general son funciones de la densidad y la temperatura) sean positivos. Los órdenes de magnitud de los coeficientes de Frank se encuentran comúnmente entre 10^{-7} y 10^{-6}erg/cm [46], [52]. Debido a que $\nabla \cdot \vec{n} = \partial_l n_l$, $\vec{n} \times (\nabla \times \vec{n}) = -(\vec{n} \cdot \nabla) \vec{n}$ y $\nabla \times \vec{n} = \epsilon_{lki} \partial_k n_i$, la densidad de energía libre (1.26) puede escribirse como

$$\mathcal{F}_d = \frac{1}{2} K_{ijkl} \partial_j n_i \partial_l n_k, \quad (1.27)$$

en donde

$$K_{ijkl} = K_1 \delta_{ij} \delta_{kl} + K_2 n_p \epsilon_{pij} n_q \epsilon_{qkl} + K_3 n_j n_l \delta_{ik}. \quad (1.28)$$

Cabe señalar que el tensor (1.28) satisface la propiedad de simetría $K_{ijkl} = K_{klij}$. Asimismo, obsérvese que las expresiones (1.26) o (1.27) revelan no sólo que \mathcal{F}_d es una función cuadrática de los gradientes $\partial_j n_i$ sino que también lo es de n_i mismo, por lo que en general $\mathcal{F}_d = \mathcal{F}_d(n_i, \partial_j n_i)$ y en consecuencia $\mathcal{F} = \mathcal{F}(T, n_i, \partial_j n_i)$.

En el estado de equilibrio alcanzado por el nemático una vez concluido el proceso de deformación elástica, los valores que tomen todas sus variables serán aquellos que minimicen a la densidad de energía libre de Helmholtz. Por consiguiente, para hallar a las variables intensivas τ_{ij} , se calculará el mínimo de la función de energía libre total $\int \mathcal{F} dV$, la cual es una funcional de \vec{n} (\vec{r}). Debido a que n_i es un vector unitario, esta funcional debe ser minimizada tomando en consideración la condición $n_i^2 = 1$. Mediante el método de los multiplicadores indeterminados de Lagrange, podemos igualar a cero la variación

$$\delta \int \left[\mathcal{F} - \frac{1}{2} \bar{\lambda}(\vec{r}) n_i^2 \right] dV, \quad (1.29)$$

en donde $\bar{\lambda}(\vec{r})$ es una función arbitraria. Dado que \mathcal{F} depende de $n_i(\vec{r})$ y sus derivadas, de acuerdo con el cálculo variacional,

$$\begin{aligned} \delta \int \mathcal{F} dV &= \int \left[\frac{\partial \mathcal{F}}{\partial n_i} \delta n_i + \frac{\partial \mathcal{F}}{\partial (\partial_k n_i)} \partial_k \delta n_i \right] dV \\ &= \int \left[\frac{\partial \mathcal{F}_d}{\partial n_i} - \partial_k \frac{\partial \mathcal{F}_d}{\partial (\partial_k n_i)} \right] \delta n_i dV + \oint \frac{\partial \mathcal{F}_d}{\partial (\partial_k n_i)} \delta n_i df_k. \end{aligned} \quad (1.30)$$

El segundo término del miembro derecho de (1.30) es una integral de superficie que es importante sólo si se toma en consideración en las fronteras este tipo de efectos. Al suponer que en las fronteras $\delta n_i = 0$, se tiene que la variación de la energía libre total es

$$\delta \int \mathcal{F}_d dV = - \int H_i \delta n_i dV$$

en donde H_i es un vector cuyas componentes son [59]

$$H_i = \partial_k \Phi_{ki} - \frac{\partial \mathcal{F}_d}{\partial n_i}, \quad (1.31)$$

siendo

$$\Phi_{ki} = \frac{\partial \mathcal{F}_d}{\partial (\partial_k n_i)}. \quad (1.32)$$

Al imponer la condición de equilibrio a (1.29) se obtiene

$$\int (H_i + \bar{\lambda}n_i) \delta n_i dV = 0, \quad (1.33)$$

y dado que la variación δn_i es arbitraria, se encuentra

$$H_i = -\bar{\lambda}n_i, \quad (1.34)$$

que es la condición de equilibrio buscada y de la cual se desprende que $\bar{\lambda} = -H_i n_i$. El resultado (1.34) indica que en el estado de equilibrio \vec{H} y \vec{n} deben ser colineales en cada punto del nemático. Al vector \vec{H} se le denomina campo molecular. Dado que n_i está normalizada, esto es, $n_i^2 = 1$, se tiene que $n_i dn_i = 0$; por consiguiente, $H_i n_i dn_i = 0$, lo cual implica que $H_i n_i = 0$. La condición anterior significa que la componente de H_i longitudinal al campo director carece de relevancia, de manera que sólo su componente transversal posee significado físico; por tal motivo, comúnmente se acostumbra escribir a H_i en la forma [59]

$$h_i = H_l \delta_{il}^\perp = H_l (\delta_{il} - n_i n_l) = H_i - n_i (n_l H_l), \quad (1.35)$$

la cual satisface la condición $n_i h_i = 0$. La delta de Kronecker transversa, $\delta_{il}^\perp \equiv \delta_{il} - n_i n_l$, proyecta a H_i en el plano perpendicular a n_i .

Al considerar la densidad de energía libre (1.27) en (1.32), ésta toma la forma [3]

$$\Phi_{ki} = K_{ikrj} \partial_j n_r. \quad (1.36)$$

Derivando (1.36) respecto a k y a (1.27) respecto a n_i , se encuentran las expresiones

$$\partial_k \Phi_{ki} = \frac{\partial}{\partial n_p} (K_{ikrj}) \partial_k n_p \partial_j n_r + K_{ikrj} \partial_k \partial_j n_r \quad (1.37)$$

y

$$\frac{\partial \mathcal{F}_d}{\partial n_i} = \frac{1}{2} \delta_{iq} \frac{\partial}{\partial n_q} (K_{pjkil}) \partial_j n_p \partial_l n_k, \quad (1.38)$$

respectivamente. Al considerar (1.37) y (1.38), el campo molecular (1.31) toma la forma

$$H_i = K_{ijkl} \partial_j \partial_l n_k - \delta_{iq} \left(\frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial n_q} K_{pjkil} - \frac{\partial}{\partial n_p} K_{qjkl} \right) \partial_j n_p \partial_l n_k. \quad (1.39)$$

De esta manera, mediante (1.39), el campo molecular transversal (1.35) es

$$h_i = \delta_{ir}^\perp K_{rjkl} \partial_j \partial_l n_k - \delta_{iq}^\perp \left(\frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial n_q} K_{pjkil} - \frac{\partial}{\partial n_p} K_{qjkl} \right) \partial_j n_p \partial_l n_k. \quad (1.40)$$

Dado que $\mathcal{F} = \mathcal{F}(T, n_i, \partial_j n_i)$ y $\mathcal{F}(T, n_i, \partial_j n_i) = \mathcal{F}_0(T) + \mathcal{F}_d(n_i, \partial_j n_i)$, la cual es una generalización de (1.20), se encuentra que la forma diferencial de la densidad de energía libre (1.19) puede expresarse como

$$d\mathcal{F}(T, n_i, \partial_j n_i) = -\sigma dT + (\partial_k \Phi_{ki} - H_i) dn_i + \Phi_{ji} d(\partial_j n_i). \quad (1.41)$$

La comparación directa entre (1.41) y (1.19), permite concluir que $\partial_k \Phi_{ki} - H_i$ y Φ_{ki} son las fuerzas generalizadas τ_{ik} buscadas; precisamente, ambas pueden interpretarse como fuerzas termodinámicas generalizadas

vectorial y tensorial, respectivamente, que producen las distorsiones elásticas o los desplazamientos generalizados dn_i y $\partial_k n_i$ en el campo director. Ciertamente, las fuerzas Φ_{ki} y $\partial_k \Phi_{ki} - H_i$ se anulan en el estado no distorsionado, ya que en él no existen fuerzas que produzcan deformaciones en el campo director.

Estas identificaciones permiten escribir a los potenciales termodinámicos para la densidad volumétrica de energía interna y la energía interna dadas por (1.15) y (1.16), respectivamente, como

$$\mathcal{U}(\sigma, n_i, \partial_j n_i) = T\sigma - p + (\partial_k \Phi_{ki} - H_i) n_i + \Phi_{ji} \partial_j n_i \quad (1.42)$$

y

$$U(S, V, Vn_i, V\partial_j n_i) = TS - pV + (\partial_k \Phi_{ki} - H_i) Vn_i + \Phi_{ji} V\partial_j n_i. \quad (1.43)$$

La comparación de (1.42) con (1.21) arroja que las densidades de energía interna del medio nemático sin deformar $\mathcal{U}_0(\sigma)$ y del medio deformado por las distorsiones del campo director $\mathcal{U}_d(n_i, \partial_j n_i)$ se escriben, respectivamente, como

$$\mathcal{U}_0(\sigma) = \mathcal{U}(\sigma) = T\sigma - p \quad (1.44)$$

y

$$\mathcal{U}_d(n_i, \partial_j n_i) = \mathcal{U}(n_i, \partial_j n_i) = (\partial_k \Phi_{ki} - H_i) n_i + \Phi_{ji} \partial_j n_i. \quad (1.45)$$

De (1.17) y (1.14) se desprende que las formas diferenciales de (1.42) y (1.43) son, respectivamente,

$$dU = TdS - pdV + (\partial_k \Phi_{ki} - H_i) d(Vn_i) + \Phi_{ji} d(V\partial_j n_i) \quad (1.46)$$

y

$$d\mathcal{U} = Td\sigma + (\partial_k \Phi_{ki} - H_i) dn_i + \Phi_{ji} d(\partial_j n_i). \quad (1.47)$$

Dado que $\mathcal{U} = \mathcal{U}(\sigma, n_i, \partial_j n_i)$ y puede escribirse en la forma (1.21), del cálculo de su forma diferencial $d\mathcal{U}$ y de las expresiones (1.44) y (1.45) se siguen las relaciones

$$\left(\frac{\partial \mathcal{U}}{\partial \sigma} \right)_{n_i, \partial_k n_i} = \left(\frac{\partial \mathcal{U}_0}{\partial \sigma} \right)_{n_i, \partial_k n_i} = T, \quad (1.48)$$

$$\left(\frac{\partial \mathcal{U}}{\partial n_i} \right)_{\sigma, \partial_k n_i} = \left(\frac{\partial \mathcal{U}_d}{\partial n_i} \right)_{\sigma, \partial_k n_i} = \partial_k \Phi_{ki} - H_i, \quad (1.49)$$

$$\left[\frac{\partial \mathcal{U}}{\partial (\partial_j n_i)} \right]_{\sigma, n_i} = \left[\frac{\partial \mathcal{U}_d}{\partial (\partial_j n_i)} \right]_{\sigma, n_i} = \Phi_{ji}. \quad (1.50)$$

Es preciso señalar que \mathcal{U}_d es idéntica a \mathcal{F}_d , tal como puede constatararse al comparar (1.20) con (1.21). Esta aseveración resulta cierta, excepto que en \mathcal{U}_d dada por (1.45), los coeficientes elásticos de Frank K_1 , K_2 y K_3 presentes en Φ_{ki} (como lo indica (1.36)) en general deberán ser funciones de la densidad y la entropía, no de la temperatura.

Las condiciones a la frontera que deben satisfacer las ecuaciones de equilibrio no pueden ser deducidas de una forma general, ya que dependen no solamente de la energía elástica (1.26) sino también de la forma específica en la que interactúan el nemático y las paredes que lo limitan. Esta contribución a la densidad

de energía debidas a los efectos en las superficies, debe ser añadida a la densidad de energía total y ser minimizada para hallar la condición de equilibrio correspondiente. Las fuerzas superficiales pueden ser lo suficientemente grandes como para determinar la dirección \vec{n} en las fronteras, independientemente del tipo de deformación que se tenga en el resto de la muestra nemática.

El estudio termodinámico mediante la energía libre de Helmholtz realizado al nemático, ha permitido hallar la condición de equilibrio cuando este sistema se encuentra distorsionado por fuerzas elásticas (representadas por el tensor τ_{ik}) y que la forma explícita de las mismas es $\partial_k \Phi_{ki} - H_i$ y Φ_{ki} . Empero, dicha descripción resulta aún limitada dado que el nemático puede fluir. Una manera de incorporar los efectos del flujo es a través del potencial termodinámico de energía generalizado, tal como se mostrará más adelante.

1.4. Descripción hidrodinámica

El método hidrodinámico se basa en el hecho de que para la mayoría de los sistemas condensados, existe un cierto número de procesos lentos, en contraste con la gran cantidad de grados de libertad microscópicos rápidos, y que, por lo tanto, pueden despreciarse en una descripción macroscópica. Las variables hidrodinámicas describen “fenómenos cooperativos”¹³ cuya dinámica es muy lenta; es decir, poseen tiempos de vida o de decaimiento sumamente grandes comparados con los microscópicos, de modo que las frecuencias ω a las que ocurren acaban por anularse en la medida que sus correspondientes vectores de onda \vec{k} tienden a cero [3], [104]. Este comportamiento puede representarse como $\omega(k \rightarrow 0) \rightarrow 0$. Es importante señalar que las variables hidrodinámicas pueden únicamente ser identificadas por medio de leyes de conservación (relacionadas a simetrías globales) y por medio de rompimientos de simetría (en el caso de fluidos complejos).

1.4.1. Ecuaciones de movimiento de balance y conservación

Para cualquier cantidad extensiva $\hat{\mathcal{A}}$, existe una propiedad específica $\hat{A}(\vec{r}, t)$ definida como la densidad volumétrica de $\hat{\mathcal{A}}$ en un punto espacial $\vec{r} = (x, y, z)$ al instante t . La evolución espacial y temporal de la propiedad $\hat{A}(\vec{r}, t)$ estará determinada por una ecuación de balance [12]

$$\frac{\partial}{\partial t} \hat{A}(\vec{r}, t) + \nabla \cdot \vec{J}_{\hat{A}}(\vec{r}, t) = \sigma_{\hat{A}}(\vec{r}, t), \quad (1.51)$$

en donde $\vec{J}_{\hat{A}}(\vec{r}, t)$ es el flujo o densidad de corriente de $\hat{\mathcal{A}}$ y $\sigma_{\hat{A}}(\vec{r}, t)$ es la fuente interna o producción de $\hat{\mathcal{A}}$ por unidad de volumen y de tiempo (debido a reacciones químicas, por ejemplo).

Por otra parte, si $\hat{\mathcal{A}}$ es una cantidad conservada, tal como la masa, la cantidad de movimiento o la energía totales del sistema, entonces no debe haber “creación” o “destrucción” de $\hat{\mathcal{A}}$ y $\sigma_{\hat{A}} = 0$. Consecuentemente, (1.51) da lugar a la ecuación de conservación

$$\frac{\partial}{\partial t} \hat{A}(\vec{r}, t) + \nabla \cdot \vec{J}_{\hat{A}}(\vec{r}, t) = 0. \quad (1.52)$$

¹³Con el término “fenómenos cooperativos” se hace referencia a los modos hidrodinámicos del nemático. Una discusión amplia de éstos se dará en el Capítulo 4.

La ecuación (1.52) constituye la forma diferencial de una ley macroscópica de conservación y representa, a nivel local, la conservación total de la cantidad \hat{A} . Esto significa que \hat{A} , además de que en cada punto del fluido debe satisfacer la ecuación (1.52), no puede ser creada o destruida: sólo puede fluir o ser transportada.

1.4.1.1. Modos hidrodinámicos

Las ecuaciones (1.51) y (1.52) se aplican tanto para un sistema alejado del equilibrio o un sistema que experimenta fluctuaciones térmicas espontáneas. Estas cantidades estocásticas se definen en términos de las desviaciones deterministas $\hat{A}(\vec{r}, t) = \langle \hat{A} \rangle + \delta \hat{A}(\vec{r}, t)$, $\vec{J}_{\hat{A}}(\vec{r}, t) = \langle \vec{J}_{\hat{A}} \rangle + \delta \vec{J}_{\hat{A}}(\vec{r}, t)$ y $\sigma_{\hat{A}}(\vec{r}, t) = \langle \sigma_{\hat{A}} \rangle + \delta \sigma_{\hat{A}}(\vec{r}, t)$, en donde $\langle \hat{A} \rangle$, $\langle \vec{J}_{\hat{A}} \rangle$, $\langle \sigma_{\hat{A}} \rangle$ son los valores en el estado de equilibrio y $\delta \hat{A}(\vec{r}, t)$, $\delta \vec{J}_{\hat{A}}(\vec{r}, t)$, $\delta \sigma_{\hat{A}}(\vec{r}, t)$ las desviaciones respecto a dicho estado. En equilibrio los valores mecánico-estadísticos promedio del flujo y de la fuente $\langle \vec{J}_{\hat{A}} \rangle$, $\langle \sigma_{\hat{A}} \rangle$ se anulan y $\langle \hat{A} \rangle$ es independiente de \vec{r} y t , de modo que al sustituir las cantidades señaladas en (1.51), se encuentra que la dinámica de las fluctuaciones se describe por medio de una ecuación con la misma estructura que (1.51), esto es,

$$\frac{\partial}{\partial t} \delta \hat{A}(\vec{r}, t) + \nabla \cdot \delta \vec{J}_{\hat{A}}(\vec{r}, t) = \delta \sigma_{\hat{A}}(\vec{r}, t). \quad (1.53)$$

Una característica interesante de la ecuación (1.53) resulta notoria cuando se le aplica a un sistema infinito la transformada de Fourier espacial, esto es,

$$\frac{\partial}{\partial t} \delta \hat{A}(\vec{k}, t) = i \vec{k} \cdot \delta \vec{J}_{\hat{A}}(\vec{k}, t) + \delta \sigma_{\hat{A}}(\vec{k}, t), \quad (1.54)$$

en donde $\delta \hat{A}(\vec{k}, t)$, $\delta \vec{J}_{\hat{A}}(\vec{k}, t)$ y $\delta \sigma_{\hat{A}}(\vec{k}, t)$ son, respectivamente, las transformadas de Fourier espaciales de $\delta \hat{A}(\vec{r}, t)$, $\delta \vec{J}_{\hat{A}}(\vec{r}, t)$ y $\delta \sigma_{\hat{A}}(\vec{r}, t)$. Cuando $\hat{A}(\vec{k}, t)$ corresponde a una cantidad conservada ($\delta \sigma_{\hat{A}}(\vec{k}, t) = 0$), se obtiene

$$\frac{\partial}{\partial t} \delta \hat{A}(\vec{k}, t) = i \vec{k} \cdot \delta \vec{J}_{\hat{A}}(\vec{k}, t); \quad (1.55)$$

en consecuencia, conforme $k \rightarrow 0$ la variación temporal de $\delta \hat{A}(\vec{k}, t)$, es decir, $\frac{\partial}{\partial t} \delta \hat{A}(\vec{k}, t)$, se aproxima a cero. Esto significa que el tiempo de vida o de decaimiento $\tau(k)$ de este tipo de fluctuaciones se vuelve infinitamente largo ($\tau(k) \rightarrow \infty$) conforme $k \rightarrow 0$. Cualquier desviación con esta propiedad, recibe el nombre de modo hidrodinámico. Los modos hidrodinámicos pueden clasificarse en varios tipos de acuerdo con su comportamiento en el límite $k \rightarrow 0$. Dado que se obtienen de las raíces de la relación de dispersión $\omega(k)$ asociada a la ecuación (1.55), pueden ser puramente difusivos si éstas son reales o sólo propagativos si son complejas conjugadas. Si $\hat{A}(\vec{k}, t)$ no es una propiedad conservada, $\delta \sigma_{\hat{A}}(\vec{k}, t) \neq 0$ y se tiene que $\frac{\partial}{\partial t} \delta \hat{A}(\vec{k}, t) \neq 0$ conforme $k \rightarrow 0$. Por lo tanto, las fluctuaciones de densidades de cantidades no conservadas, poseen tiempos de decaimiento finitos $\tau(k)$ a medida que $k \rightarrow 0$. Es preciso mencionar que en ciertos casos las variables no conservadas también presentan modos hidrodinámicos, lo cual ocurre en sistemas en los que se tienen rompimientos de simetría; como es el caso, por ejemplo, de la transición de la fase paramagnética a la ferromagnética o la de un líquido isótropo a la de un cristal líquido, tal como se discutirá más adelante. Los modos hidrodinámicos juegan un papel preponderante en la determinación del espectro de dispersión de

luz, como podrá apreciarse en los capítulos 5 y 6 en los que se calcula para un cristal líquido nemático en diferentes estados estacionarios de no equilibrio termodinámico.

Es importante señalar que las ecuaciones de conservación, por sí mismas, no constituyen un conjunto cerrado de ecuaciones, sino que deben “cerrarse” especificando las “relaciones constitutivas” que vinculan al flujo $\vec{J}_{\hat{A}}(\vec{r}, t)$ con la propiedad $\hat{A}(\vec{r}, t)$. Un formalismo sistemático con el cual pueden determinarse ecuaciones constitutivas lineales lo proporciona la teoría termodinámica fuera de equilibrio.

1.4.2. Principios de conservación de masa, cantidad de movimiento y energía

El estado de un medio nemático en movimiento está determinado por la distribución espacio-temporal de las densidades volumétricas escalares de masa ρ y de energía \mathcal{E} (o de entropía σ), así como las vectoriales de cantidad de movimiento $\rho \vec{v}$ y el director n_i . Es decir, la descripción hidrodinámica requiere de ocho variables locales y el conjunto completo de ecuaciones hidrodinámicas de movimiento que describen, localmente, la evolución espacial y temporal de estas cantidades para un nemático son del tipo de ecuaciones en derivadas parciales de balance (1.51) y conservación (1.52) señaladas con anterioridad. La deducción de estas ecuaciones está bien establecida y puede consultarse en una amplia variedad de referencias [3], [44], [45], [46], [47]. En lo que resta de la presente sección, así como en las siguientes, se hacen comentarios y se muestran algunos detalles sobre la deducción de las mismas.

1.4.2.1. Ecuación de conservación de masa

La densidad volumétrica de masa ρ , está regida por la ecuación de conservación [5]

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_k} (\rho v_k) = 0, \quad (1.56)$$

y al emplear $\partial (\rho v_k) / \partial x_k = \rho \partial v_k / \partial x_k + v_k \partial \rho / \partial x_k$, puede escribirse como

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + v_k \partial_k \right) \rho + \rho \frac{\partial}{\partial x_k} v_k = 0. \quad (1.57)$$

1.4.2.2. Ecuación de balance de la cantidad de movimiento

La densidad de cantidad de movimiento ρv_i , obedece a la ecuación de balance [5]

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho v_i) + \frac{\partial}{\partial x_j} \Pi_{ij} = \rho f_i, \quad (1.58)$$

en donde

$$\Pi_{ij} \equiv \rho v_j v_i - \sigma_{ij}, \quad (1.59)$$

es la densidad de corriente de cantidad de movimiento tensorial, siendo σ_{ij} el tensor de esfuerzos y f_i la resultante de todas las fuerzas volumétricas externas por unidad de masa que actúan sobre el fluido. En la ecuación (1.58) ρf_i es el término fuente o de producción de la cantidad de movimiento. Si las fuerzas volumétricas externas pueden despreciarse ($f_i = 0$), la ecuación (1.58) toma la forma de una ecuación de

conservación; en este caso, la densidad de cantidad de movimiento ρv_i es una cantidad conservada. Al sustituir (1.59) y (1.56) en (1.58), y como $\partial(\rho v_k)/\partial x_k = -\partial\rho/\partial t$, se obtiene

$$\rho \left(\frac{\partial}{\partial t} + v_j \frac{\partial}{\partial x_j} \right) v_i - \frac{\partial}{\partial x_j} \sigma_{ij} = \rho f_i. \quad (1.60)$$

En la formulación del tensor de esfuerzos σ_{ij} debe considerarse que, cuando el fluido nemático está en reposo y en el estado no deformado, los esfuerzos son hidrostáticos y la presión ejercida por el fluido debe ser la presión termodinámica p . Esta condición permite escribir al tensor de esfuerzos en la forma $\sigma_{ij} \equiv -p\delta_{ij}$, la cual coincide con (1.12) si en ella se hace $\tau_{ij} = 0$. Sin embargo, cuando el fluido nemático fluye y se deforma, $\tau_{ij} \neq 0$, por lo que deben tomarse en consideración los efectos producidos por el flujo. Por una parte, el flujo de cantidad de movimiento dado por (1.59) representa una transferencia de esta cantidad de manera completamente reversible, debida básicamente al transporte mecánico de diferentes partículas del fluido de un lugar a otro y a la presencia de fuerzas de presión que actúan sobre el mismo. Por otro lado, la viscosidad (o fricción interna) causa otro tipo de transferencia de cantidad de movimiento, irreversible, de puntos donde la velocidad es mayor a otros donde es menor. Ambos efectos debidos a la circulación del fluido nemático, deben estar incluidos en el tensor τ_{ij} añadido al tensor de esfuerzos σ_{ij} definido en la ecuación (1.12). De esta manera, al incluir (1.12) en (1.59), la densidad de corriente de cantidad de movimiento tensorial de un nemático puede reescribirse como

$$\Pi_{ij} \equiv p\delta_{ij} + \rho v_j v_i - \tau_{ij}. \quad (1.61)$$

Es importante enfatizar que, en este contexto, el tensor de deformaciones τ_{ij} (indicado en (1.12)) no sólo toma en cuenta la información relativa a las deformaciones del nemático causadas por sus interacciones con los alrededores, sino también los efectos reversibles e irreversibles ocasionados por el movimiento que experimenta este medio cuando fluye. Más adelante, en las secciones 1.6 y 1.7, se precisará la forma que adquiere de este tensor.

1.4.2.3. Ecuación de conservación de la energía

La densidad de energía, definida como

$$\mathcal{E} = \frac{1}{2}\rho v_i^2 + \mathcal{U}, \quad (1.62)$$

en donde $\frac{1}{2}\rho v_i^2$ y \mathcal{U} son, respectivamente, las densidades de energía cinética e interna por unidad de volumen, obedece la ecuación [5], [59]

$$\frac{\partial}{\partial t} \mathcal{E} + \frac{\partial}{\partial x_k} (\mathcal{E} v_k) - \frac{\partial}{\partial x_i} (v_j \sigma_{ij}) - v_i \rho f_i + \frac{\partial}{\partial x_i} q_i = 0, \quad (1.63)$$

en la que q_i es el flujo de calor de conducción. Si la suma de las fuerzas volumétricas f_i es conservativa, esto es, si puede deducirse de un potencial ϕ independiente del tiempo de modo que

$$f_i = -\frac{\partial \phi}{\partial x_i} \quad \text{y} \quad \frac{\partial \phi}{\partial t} = 0, \quad (1.64)$$

también puede obtenerse una ecuación de balance para la densidad de potencial $\rho\phi$, dada por

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho\phi) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho\phi v_i) = -\rho v_i f_i. \quad (1.65)$$

En la deducción de (1.65) se ha calculado la derivada parcial respecto al tiempo de $\rho\phi$, se ha utilizado la condición (1.64), la ecuación de conservación de masa (1.56) y la relación $v_i\rho(\partial\phi/\partial x_i) = \partial(v_i\rho\phi)/\partial x_i - \phi\partial(v_i\rho)/\partial x_i$.

De esta manera, al suponer ahora que la densidad de energía total \mathcal{E} está constituida por la suma de las densidades de energía cinética $\frac{1}{2}\rho v_i^2$, potencial $\rho\phi$ e interna \mathcal{U} , la definición (1.62) se amplía en la forma

$$\mathcal{E} \equiv \frac{1}{2}\rho v_i^2 + \rho\phi + \mathcal{U}. \quad (1.66)$$

Por consiguiente, al emplear las expresiones (1.63) y (1.65), se deduce la ecuación

$$\frac{\partial}{\partial t}\mathcal{E} + \frac{\partial}{\partial x_i}Q_i = 0, \quad (1.67)$$

en donde

$$Q_i \equiv \mathcal{E}v_i - v_j\sigma_{ij} + q_i \quad (1.68)$$

es la densidad de corriente de energía. La expresión (1.67) es una ecuación de conservación e indica que la densidad volumétrica de energía total \mathcal{E} es una cantidad conservada.

Potencial termodinámico generalizado de energía Consideremos como sistema termodinámico a una porción de forma arbitraria del fluido nemático en movimiento, de volumen V y cuyas moléculas siempre son las mismas. En la descripción termodinámica que se realizará a continuación, se supondrá que son relevantes los efectos macroscópicos producidos por las interacciones de corto alcance entre las moléculas del sistema, los causados por los efectos derivados por la presencia de fuerzas externas, así como los de las posibles interacciones de largo alcance en el mismo. Por tal motivo, escribiremos la densidad de energía total instantánea (1.66) como

$$\mathcal{E} \equiv \frac{1}{2}v_i\bar{g}_i + \mathfrak{p} + \mathcal{U}, \quad (1.69)$$

en donde $\bar{g}_i \equiv \rho v_i$ denota la densidad de cantidad de movimiento y $\mathfrak{p} \equiv \rho\phi$ la densidad de energía potencial. La sustitución de (1.42) en (1.69) permite escribir

$$\mathcal{E} = \frac{1}{2}v_i\bar{g}_i + \mathfrak{p} + T\sigma - p + (\partial_k\Phi_{ki} - H_i)n_i + \Phi_{ji}\partial_j n_i. \quad (1.70)$$

En esta expresión para la densidad de energía \mathcal{E} , supondremos que las variables independientes son \bar{g}_i , \mathfrak{p} , σ , n_i y $\partial_j n_i$; es decir, $\mathcal{E} = \mathcal{E}(\bar{g}_i, \mathfrak{p}, \sigma, n_i, \partial_j n_i)$.

Alrededor del estado de equilibrio, puede hacerse un desarrollo en serie de potencias, hasta segundo orden en las desviaciones del equilibrio, de la densidad volumétrica de energía total. Este desarrollo, tomando en consideración (1.70), se escribe como

$$\begin{aligned}\mathcal{E} = \mathcal{E}^0 + \frac{1}{2}v_i\delta\bar{g}_i + \delta\mathfrak{p} + T\delta\sigma + (\partial_k\Phi_{ki} - H_i)\delta n_i + \Phi_{ji}\delta(\partial_j n_i) \\ + \frac{1}{2\rho}\delta\bar{g}_i^2 + \frac{T}{2\rho c_v}\delta\sigma^2 + \frac{1}{2}K_{ijkl}\delta(\partial_j n_i)\delta(\partial_k n_l),\end{aligned}\quad (1.71)$$

en donde $\delta\bar{g}_i$, $\delta\mathfrak{p}$, $\delta\sigma$, δn_i y $\delta(\partial_k n_i)$ denotan las desviaciones que experimentan las variables \bar{g}_i , \mathfrak{p} , σ , n_i y $\partial_j n_i$, respectivamente, durante el proceso de deformación respecto al estado no deformado; mientras que $c_v = (T/\rho)(\partial\sigma/\partial T)_v$ es el calor específico a volumen constante. En la deducción de (1.71), se han considerado las únicas segundas derivadas parciales de \mathcal{E} distintas de cero, que son: $\partial^2\mathcal{E}/\partial\bar{g}_i^2 = 1/\rho$, $\partial^2\mathcal{E}/\partial\sigma^2 = T/(\rho c_v)$ y $\partial^2\mathcal{E}/[\partial(\partial_r n_s)\partial(\partial_k n_i)] = K_{kirs}$.

Como en equilibrio termodinámico la densidad de energía tiene un mínimo, las variables de estado $\delta\bar{g}_i$, $\delta\mathfrak{p}$, $\delta\sigma$, δn_i , $\delta(\partial_k n_i)$ se anulan por definición. Esto significa que para un estado de no equilibrio, resulta posible escribir la desviación $\delta\mathcal{E} \equiv \mathcal{E} - \mathcal{E}^0$ de la densidad de energía total respecto a su valor en el estado de equilibrio. En una primera aproximación, para desviaciones pequeñas, a partir de (1.71) se obtiene la expresión cuadrática de las variables de estado $\delta\bar{g}_i$, $\delta\sigma$, $\delta(\partial_k n_i)$

$$\delta\mathcal{E} = \frac{1}{2\rho}\delta\bar{g}_i^2 + \frac{T}{2\rho c_v}\delta\sigma^2 + \frac{1}{2}K_{kirs}(\partial_r n_s)(\partial_k n_i).\quad (1.72)$$

La variación de la densidad de energía (1.72) satisface los requerimientos de anisotropía en la energía, y al ser una función par en \vec{n} , también los de simetría $n_i \rightarrow -n_i$ del director. Además, (1.72) da lugar a las cantidades conjugadas apropiadas que describen las desviaciones respecto a sus valores en equilibrio

$$\delta T = \frac{\partial\mathcal{E}}{\partial\sigma} = \frac{T}{\rho c_v}\delta\sigma,\quad (1.73)$$

$$\delta v_i = \frac{\partial\mathcal{E}}{\partial\bar{g}_i} = \frac{1}{\rho}\delta\bar{g}_i,\quad (1.74)$$

$$\delta\Phi_{ki} = \frac{\partial\mathcal{E}}{\partial(\partial_k n_i)} = \frac{1}{2}K_{kirs}\partial_r n_s.\quad (1.75)$$

La condición de estabilidad termodinámica requiere que la densidad de energía (1.72) alrededor del estado de equilibrio sea positiva definida, lo cual impone restricciones sobre las susceptibilidades c_v , ρ , K_1 , K_2 , K_3 siendo todas ellas positivas. Si alguna de estas cantidades no resulta positiva, entonces el sistema será termodinámicamente inestable y tendrá que llevarse a su estado mínimo de energía para que alcance el estado de equilibrio.

Estrictamente las relaciones (1.73)-(1.75) no dependen linealmente de las variables de interés, dado que todas las susceptibilidades fenomenológicas son aún funciones de las cantidades escalares del sistema; por ejemplo c_v , ρ , K_1 , etc. pueden depender de la temperatura o de la presión, y además todos los tensores materiales son funciones del vector director n_i . Esto último propicia que en general $h_i \equiv \partial\mathcal{E}/\partial n_i = [\partial K_{ijkl}(\vec{n})/\partial n_i](\partial_l n_k)(\partial_j n_p)$ no se anule en vez de como debe ocurrir, que sea cero en el límite homogéneo [3]. Se obtienen ecuaciones lineales, cuando las dependencias señaladas se ignoran o cuando las variables, de

las cuales dependen las susceptibilidades y los tensores materiales, se reemplazan por sus valores constantes en el estado de equilibrio.

Finalmente, de acuerdo con la descripción termodinámica local, el sistema se encuentra en el estado de equilibrio si dos volúmenes adyacentes infinitesimalmente pequeños (que pueden intercambiar energía y cantidad de movimiento), presentan la misma temperatura y campo de velocidades. Así, el equilibrio global requiere que T y v_i sean constantes en el espacio y el tiempo. El campo director n_i permanece constante en un estado de equilibrio sin restricciones, en el que generalmente $h_i = 0$ o Φ_{ki} es una constante. Dado que en el estado de equilibrio las cantidades termodinámicas conjugadas son constantes en el espacio, cualquier distribución inhomogénea de éstas ocasionará que el sistema se aleje de dicho estado. Por esta razón los gradientes de las cantidades termodinámicas (1.73)-(1.75) se denominan fuerzas termodinámicas y, por consiguiente, $\partial_i T$, $\partial_j v_i$ y $\partial_j \Phi_{ij}$ (o h_i) producirán un movimiento (irreversible) en el sistema.

1.5. Rompimiento de simetrías

En la sección anterior se mostró que las densidades volumétricas de masa ρ , de cantidad de movimiento \bar{g}_i y de energía \mathcal{E} son cantidades conservadas. Existe otra clase de variables hidrodinámicas que están asociadas al rompimiento espontáneo y continuo de simetrías [55], [104]. En la fase isotrópica de un nemático (como en un líquido isotrópico) la energía libre del sistema y el sistema mismo son isotrópicos, es decir, invariantes ante rotaciones. Por debajo de la temperatura de aclaramiento T_c , en la fase nemática, las moléculas exhiben orden orientacional que se representa por una dirección especial (caracterizada por el vector director \vec{n}). En esta fase no se preserva dicha invariancia: cualquier rotación respecto a un eje diferente al que se encuentra \vec{n} , dará lugar a propiedades distintas a las que se obtienen cuando las rotaciones toman como referencia al eje en el que se localiza \vec{n} , lo cual le confiere a este sistema su carácter anisótropo. Este doble rompimiento de simetría rotacional se llama espontáneo, ya que la energía es todavía invariante ante rotaciones y no hay energía presente (en un sistema infinito) que favorezca alguna dirección de \vec{n} sobre otras; dicho de otro modo, todas las propiedades con distintas orientaciones del director, son equivalentes energéticamente. Este comportamiento da lugar a un modo hidrodinámico: al producirse una rotación homogénea del director, no se tienen costos de energía ni fuerzas restitutivas (la dinámica del sistema es infinitamente lenta), mientras que al presentarse rotaciones inhomogéneas (denominadas bend, twist y splay), sí existen fuerzas restauradoras que son proporcionales al tamaño de la inhomogeneidad. En consecuencia, el resultado es una excitación hidrodinámica caracterizada por $\omega(k \rightarrow 0) \rightarrow 0$. Por consiguiente, puede establecerse la siguiente aseveración bastante general: a cualquier rompimiento espontáneo y continuo de una simetría, le corresponderá una variable hidrodinámica denominada variable de simetría, excepto cuando fuerzas de largo alcance están presentes [104].

1.5.1. Ecuación de balance del director

Si bien un cristal líquido nemático puede fluir de forma similar a la de un líquido convencional, sus regímenes son mucho más complejos y resultan mucho más difíciles de estudiar que los de líquidos isotrópicos. Esto se debe a que los campos director n_i y de velocidades v_i del flujo están acoplados entre sí: la presencia de un flujo en el nemático puede alterar la orientación promedio de sus moléculas y, a su vez, un cambio en la alineación de las mismas induce, generalmente, flujos en éste. Desde un punto de vista teórico, el acoplamiento entre el director y el flujo es de suma importancia, y ha sido abordado desde dos puntos de vista: uno macroscópico, basado en argumentos de mecánica clásica y propuesto por Ericksen [81], [105], [106], Leslie [44], [82] y Parodi [107] (al que nos referiremos como formalismo de *ELP*); y otro basado en estudios de funciones de correlación, sugerido por el grupo de Harvard [4], [54], [79], [84] (que denominaremos como formalismo de Harvard).

De acuerdo con la teoría de *ELP*, si dn_i/dt representa la razón de cambio del director en un elemento de fluido respecto a un sistema de referencia que se mueve con él, entonces su velocidad angular local está dada por $\vec{\omega} = \vec{n} \times (d\vec{n}/dt)$ [108]. Además, si los alrededores del elemento de fluido rotan como un todo con velocidad angular $\vec{\Omega}$, entonces la razón de cambio del director asociado con un elemento de volumen del fluido respecto a sus alrededores, que denotaremos como \vec{N} , está dada por

$$\vec{N} = (\vec{\omega} - \vec{\Omega}) \times \vec{n} = \frac{d\vec{n}}{dt} - \vec{\Omega} \times \vec{n}. \quad (1.76)$$

Ésta es la ecuación fundamental de la nematodinámica y muestra los dos efectos mencionados desde un inicio que están involucrados en la dinámica del director: la presencia de flujo a través de la derivada material¹⁴ en el término $d\vec{n}/dt$ y de rotaciones del director indicadas por $\vec{\Omega} \times \vec{n}$.

Por otra parte, si el nemático se encuentra en el estado de equilibrio y no está distorsionado de manera que $\vec{h} = 0$, y se mueve como un todo en el espacio con velocidad constante, entonces la ecuación de movimiento del director simplemente debería de expresar el hecho de que los valores que tome \vec{n} son transportados a través del espacio con la misma velocidad [59]. La condición anterior significa que cada elemento de volumen del fluido nemático se traslada espacialmente con un valor de \vec{n} fijo, lo cual puede expresarse como

$$\frac{d\vec{n}}{dt} = 0. \quad (1.77)$$

Al producirse una distorsión en el nemático, en el caso general en el que se tenga cualquier movimiento, el miembro derecho de (1.77) deja de ser cero. Se ha sugerido que éste debe contener términos que dependan, en principio, de derivadas espaciales del campo de velocidades del flujo y, como una primera aproximación, que la dependencia con tales términos sea lineal [54]. Las derivadas del campo de velocidades $\partial v_i/\partial x_k$ forman un tensor que puede separarse, para pequeñas deformaciones, en una parte simétrica

$$v_{ik} = \frac{1}{2} (\partial_i v_k + \partial_k v_i) \quad (1.78)$$

¹⁴ Aquí se hace referencia a la relación $d\alpha/dt = \partial\alpha/\partial t + (\vec{v} \cdot \nabla)\alpha$, aplicable a alguna variable local α del fluido.

que representa la razón de corte que experimenta el elemento de fluido, y en otra antisimétrica

$$\Omega_{ik} = \frac{1}{2} (\partial_i v_k - \partial_k v_i) \quad (1.79)$$

que cuantifica la tasa de rotación del elemento de fluido respecto a sus propios ejes [59], [109]. La dependencia con Ω_{ik} puede determinarse al considerar una rotación uniforme del fluido nemático como un todo con velocidad angular $\vec{\Omega}$, de modo que el campo $n_i(\vec{r})$ completo rota precisamente con esa velocidad. Dicha rotación está dada por $\frac{1}{2}(\nabla \times \vec{v}) \times \vec{n}$ o $\Omega_{ki}n_k$ si se considera que la velocidad de los elementos que componen la porción del fluido nemático que rota como un todo es $\vec{v} = \vec{\Omega} \times \vec{r}$, por lo que $\nabla \times \vec{v} = 2\vec{\Omega}$. Por otro lado, los términos que dependen de v_{ik} deben satisfacer la condición $n_i(dn_i/dt) = 0$ (dado que $n_i^2 = 1$ es una constante), de modo que $\lambda(\delta_{il} - n_i n_l)n_k v_{kl}$ proporciona información sobre el efecto que produce el gradiente de velocidades sobre la orientación del director, siendo la constante de proporcionalidad λ un parámetro adimensional¹⁵. De esta manera, al considerar las contribuciones del campo de velocidades indicadas con anterioridad, la tasa de variación del director está dada en la forma

$$\frac{dn_i}{dt} = \Omega_{ki}n_k + \lambda(\delta_{il} - n_i n_l)n_k v_{kl}, \quad (1.80)$$

la cual al tomar en consideración las expresiones (1.78) y (1.79), puede escribirse como

$$\frac{dn_i}{dt} = \frac{1}{2}\lambda_{ijk}\partial_j v_k, \quad (1.81)$$

en donde

$$\lambda_{ijk} \equiv (\lambda - 1)\delta_{ij}^\perp n_k + (\lambda + 1)\delta_{ik}^\perp n_j. \quad (1.82)$$

El parámetro λ puede ser tanto positivo como negativo y su interpretación física es la de gobernar el comportamiento del alineamiento del flujo en un nemático. Si el nemático está constituido por moléculas alargadas en forma de barra o aplanadas en forma de disco, λ estará muy cerca de los valores 1 y -1 , respectivamente.

Las ecuaciones (1.76) y (1.81) muestran la diferencia esencial entre los formalismos de *ELP* y de Harvard: mientras que el primero considera como variable hidrodinámica al director n_i , el segundo supone que los gradientes en el campo de velocidades v_i son suficientes para describir la orientación del nemático. No obstante que en la descripción de Harvard una rotación del campo director puede ocurrir sólo si se tiene la presencia de un flujo macroscópico no uniforme, este formalismo resulta limitado pues existe evidencia experimental que muestra que es posible inducir rotaciones en el director sin la presencia de flujos [46]. De esta manera, la descripción dada por (1.81) aún es incompleta. Por lo tanto, si se considera que durante la distorsión del nemático el miembro derecho de (1.81), además de los términos que dependen linealmente con las derivadas espaciales del campo de velocidades del flujo, también cuenta con términos que presentan

¹⁵El efecto del campo de velocidades v_{kl} sobre el director n_k , se cuantifica como $n_k v_{kl}$. Sin embargo, como debe cumplirse la condición $n_i(dn_i/dt) = 0$, se considera $\delta_{il}^\perp n_k v_{kl} = (\delta_{il} - n_i n_l)n_k v_{kl}$, es decir, la proyección del campo de velocidades en un plano perpendicular a n_i .

dependencia lineal con las derivadas espaciales del campo director [79], entonces (1.81) puede modificarse como

$$\frac{dn_i}{dt} = \frac{1}{2}\lambda_{ijk}\partial_j v_k + \mathcal{N}_i, \quad (1.83)$$

en donde \mathcal{N}_i representa las contribuciones de las derivadas espaciales del campo director. La forma explícita de \mathcal{N}_i se mostrará más adelante. Una comparación directa entre (1.76) y (1.83) permite concluir que los formalismos de *EPL* y de Harvard son equivalentes si se cumple que

$$N_i = \lambda(\delta_{il} - n_i n_l) n_k v_{kl} + \mathcal{N}_i. \quad (1.84)$$

Un resultado análogo se obtiene usando argumentos de la termodinámica irreversible lineal [46]¹⁶.

Al emplear la derivada material en (1.83), se obtiene

$$\frac{\partial n_i}{\partial t} + v_j \partial_j n_i = \frac{1}{2}\lambda_{ijk}\partial_j v_k + \mathcal{N}_i \quad (1.85)$$

la cual a su vez da lugar, empleado la relación $\partial_j(v_j n_i) = v_j \partial_j n_i + n_i \partial_j v_j$, a la ecuación de balance para el campo director

$$\frac{\partial n_i}{\partial t} + \partial_j J_{ij}^n = \sigma_i^n. \quad (1.86)$$

En (1.86)

$$J_{ij}^n \equiv v_j n_i \quad (1.87)$$

es la corriente tensorial del director y

$$\sigma_i^n \equiv \frac{1}{2}\lambda_{ijk}\partial_j v_k + n_i \partial_j v_j + \mathcal{N}_i, \quad (1.88)$$

es el término fuente o de producción del director. Puede observarse que σ_i^n está constituido por contribuciones de derivadas espaciales del campo de velocidades, más derivadas espaciales del campo director incluidas en \mathcal{N}_i . Además, si $\sigma_i^n = 0$, esto es, si los gradientes en los campos de velocidades y del director son nulos, entonces (1.86) toma la forma de una ecuación de conservación e indica que el campo director en este caso es una variable conservada.

Una forma alternativa de escribir a (1.85) es

$$\frac{\partial n_i}{\partial t} + v_j \partial_j n_i + Y_i = 0, \quad (1.89)$$

en la cual el término

$$Y_i \equiv -\frac{1}{2}\lambda_{ijk}\partial_j v_k - \mathcal{N}_i, \quad (1.90)$$

es una “cuasicorriente” (al igual que $v_j \partial_j n_i$), pues su integral de superficie no es un flujo [3].

¹⁶Si bien de Gennes establece una relación entre los flujos y fuerzas termodinámicos, ésta no es del todo correcta debido a que no satisface el principio de Curie. Más adelante, en la Sección 1.7, se realiza una discusión al respecto.

1.6. Ecuación de balance de entropía

La evolución espacial y temporal de la densidad volumétrica de entropía σ , está determinada por la ecuación de balance [59]

$$\frac{\partial \sigma}{\partial t} + \frac{\partial \tilde{J}_k}{\partial x_k} = \sigma_R, \quad (1.91)$$

en donde

$$\tilde{J}_k \equiv \sigma v_k + \frac{q_k}{T}, \quad (1.92)$$

es la densidad de corriente de entropía (o densidad de flujo de entropía), siendo q_k la densidad de flujo de calor relacionada con la conductividad térmica y

$$\sigma_R \equiv \frac{2R}{T} \quad (1.93)$$

la producción de entropía en la que $2R$ recibe el nombre de *función de disipación*.

Si el proceso en consideración fuese reversible, entonces σ_R (o $2R$) y q_k serían nulos, por lo que (1.91) se reduciría a una ecuación de conservación en donde (1.92) se simplifica como $\tilde{J}_k \equiv \sigma v_k$. En esta situación física particular, la densidad volumétrica de entropía σ sería una cantidad conservada.

1.6.1. Producción de entropía

Uno de los objetivos más importantes de la termodinámica fuera del equilibrio, consiste en relacionar al término de producción de entropía σ_R (o $2R/T$) con los procesos irreversibles que ocurren en el interior del sistema. Para hallar la forma explícita de dichos términos, se partirá de la ecuación de conservación de energía (1.67) que mediante (1.66) y (1.68) puede escribirse como

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{1}{2} \rho v_i^2 + \rho \phi + \mathcal{U} \right) + \frac{\partial}{\partial x_i} (\mathcal{E} v_i - v_j \sigma_{ij} + q_i) = 0. \quad (1.94)$$

De acuerdo con (1.21), la densidad volumétrica de energía interna está dada como $\mathcal{U}(\sigma, n_i, \partial_j n_i) = \mathcal{U}^0(\sigma) + \mathcal{U}^d(n_i, \partial_j n_i)$, en donde \mathcal{U}^0 denota la densidad de energía interna del medio nemático sin deformar y \mathcal{U}^d la del medio deformado por las distorsiones del campo director. Desarrollando la derivada parcial del primer término del miembro izquierdo de (1.94), tenemos

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{1}{2} \rho v_i^2 + \rho \phi + \mathcal{U} \right) = \rho v_i \frac{\partial v_i}{\partial t} + \frac{1}{2} v_i^2 \frac{\partial \rho}{\partial t} + \phi \frac{\partial \rho}{\partial t} + T \frac{\partial \sigma}{\partial t} + \left(\frac{\partial \mathcal{U}^d}{\partial t} \right)_\sigma, \quad (1.95)$$

en donde se ha considerado $\partial \phi / \partial t = 0$ de acuerdo con (1.64) y la derivada parcial respecto del tiempo de (1.21)

$$\frac{\partial \mathcal{U}}{\partial t} = T \frac{\partial \sigma}{\partial t} + \left(\frac{\partial \mathcal{U}^d}{\partial t} \right)_\sigma \quad (1.96)$$

donde $T = \partial \mathcal{U}^0 / \partial \sigma$ según (1.48). La derivada temporal de $\mathcal{U}^d = \mathcal{U}^d(n_i, \partial_j n_i)$ es

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial \mathcal{U}^d}{\partial t} \right)_\sigma &= \frac{\partial \mathcal{U}^d}{\partial n_i} \frac{\partial n_i}{\partial t} + \frac{\partial \mathcal{U}^d}{\partial (\partial_j n_i)} \frac{\partial}{\partial t} (\partial_j n_i) \\ &= \frac{\partial \mathcal{U}}{\partial n_i} \frac{\partial n_i}{\partial t} + \frac{\partial \mathcal{U}}{\partial (\partial_j n_i)} \frac{\partial}{\partial t} (\partial_j n_i) = \left(\frac{\partial \mathcal{U}}{\partial t} \right)_\sigma, \end{aligned} \quad (1.97)$$

en donde se han considerado (1.49) y (1.50). A su vez, el término $(\partial\mathcal{U}^d/\partial t)_\sigma$ puede escribirse en la forma

$$\left(\frac{\partial\mathcal{U}^d}{\partial t}\right)_\sigma = -h_i \left(\frac{\partial n_i}{\partial t}\right) + \partial_k \left[\Phi_{ki} \left(\frac{\partial n_i}{\partial t}\right)\right] \quad (1.98)$$

en la cual se han empleado nuevamente (1.49) y (1.50), la relación $\Phi_{ki}\partial_k(\partial n_i/\partial t) = \partial_k[\Phi_{ki}(\partial n_i/\partial t)] - (\partial n_i/\partial t)\partial_k\Phi_{ki}$, así como (1.35) para reemplazar H_i por h_i (ya que la parte longitudinal de H_i desaparece pues $n_i(\partial n_i/\partial t) = 0$). Sustituyendo $\partial n_i/\partial t$ de (1.89)-(1.90) en (1.98), se obtiene

$$\left(\frac{\partial\mathcal{U}^d}{\partial t}\right)_\sigma = \frac{1}{2}v_k\partial_j(h_i\lambda_{ijk}) + h_i v_j\partial_j n_i - \mathcal{N}_i h_i + \partial_k \left(\Phi_{ki} \frac{\partial n_i}{\partial t}\right) - \frac{1}{2}\partial_j(h_i\lambda_{ijk}v_k), \quad (1.99)$$

en donde se ha empleado la relación $h_i\lambda_{ijk}\partial_j v_k = \partial_j(h_i\lambda_{ijk}v_k) - v_k\partial_j(h_i\lambda_{ijk})$.

La ecuación (1.99) puede escribirse en la forma

$$\left(\frac{\partial\mathcal{U}^d}{\partial t}\right)_\sigma = -\mathcal{G}_k v_k - \mathcal{N}_i h_i + \partial_k \left(\Phi_{ki} \frac{\partial n_i}{\partial t} - \frac{1}{2}h_i\lambda_{ikm}v_m\right), \quad (1.100)$$

en donde

$$\mathcal{G}_k \equiv -\frac{1}{2}\partial_j(h_i\lambda_{ijk}) - h_i\partial_k n_i. \quad (1.101)$$

Si definimos al tensor

$$\sigma_{ik}^{(r)} \equiv -\Phi_{kl}\partial_i n_l - \frac{1}{2}h_j\lambda_{ijk}, \quad (1.102)$$

siendo $\Phi_{kl}\partial_i n_l$ el llamado tensor de Ericksen, entonces

$$\partial_k \sigma_{ik}^{(r)} \equiv -(\partial_k \Phi_{kl}) \frac{\partial n_l}{\partial x_i} - \Phi_{kl}\partial_k\partial_i n_l - \frac{1}{2}\partial_k(h_j\lambda_{ijk}). \quad (1.103)$$

Dado que $\mathcal{U}^d = \mathcal{U}^d(n_i, \partial_j n_i)$, sus derivadas parciales respecto a las coordenadas pueden escribirse como

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial\mathcal{U}^d}{\partial x_i}\right)_\sigma &= \left(\frac{\partial\mathcal{U}^d}{\partial n_k}\right)_\sigma \partial_i n_k + \left[\frac{\partial\mathcal{U}^d}{\partial(\partial_l n_k)}\right]_\sigma \partial_i \partial_l n_k \\ &= \left(\frac{\partial\mathcal{U}^d}{\partial n_k}\right)_\sigma \partial_i n_k + \Phi_{lk}\partial_i \partial_l n_k; \end{aligned} \quad (1.104)$$

en consecuencia, si sumamos (1.103) y (1.104) se obtiene

$$\partial_k \sigma_{ik}^{(r)} + \left(\frac{\partial\mathcal{U}^d}{\partial x_i}\right)_\sigma \equiv -h_k\partial_i n_k - \frac{1}{2}\partial_k(h_j\lambda_{ijk}). \quad (1.105)$$

En la deducción de (1.105) se han empleado (1.49), (1.50) y el campo molecular (1.35) considerando $n_k\partial_i n_k = 0$. Al comparar (1.101) y (1.105) se encuentra

$$\mathcal{G}_i = \partial_k \sigma_{ik}^{(r)} + \left(\frac{\partial\mathcal{U}^d}{\partial x_i}\right)_\sigma. \quad (1.106)$$

Cabe señalar que la definición del tensor $\sigma_{ik}^{(r)}$ no es única: la expresión (1.106) no se altera si se añade a $\sigma_{ik}^{(r)}$ cualquier término $\partial_l \chi_{ilk}$, donde χ_{ilk} es cualquier tensor antisimétrico en el último par de subíndices ($\chi_{ilk} = -\chi_{ikl}$). Si bien el tensor (1.101) no es simétrico, puede adquirir esta propiedad añadiendo un término a esta forma con una elección apropiada del tensor χ_{ilk} . Por el momento se continuará con la deducción de las ecuaciones de movimiento, bajo la suposición de que $\sigma_{ik}^{(r)}$ ya se ha simetrizado [59].

Al sustituir (1.106) en (1.100), se encuentra

$$\left(\frac{\partial \mathcal{U}^d}{\partial t}\right)_\sigma = -\left(\partial_m \sigma_{km}^{(r)}\right) v_k - \left(\frac{\partial \mathcal{U}^d}{\partial x_k}\right)_\sigma v_k - \mathcal{N}_i h_i + \partial_k \left(\Phi_{ki} \frac{\partial n_i}{\partial t} - \frac{1}{2} h_i \lambda_{ikm} v_m\right). \quad (1.107)$$

De esta manera, al insertar (1.107) en (1.95) y al emplear en la expresión resultante las ecuaciones de conservación de masa (1.56), de movimiento (1.60), así como la de balance de entropía (1.91) junto con (1.92), se halla

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{1}{2} \rho v_i^2 + \rho \phi + \mathcal{U}\right) &= -\rho v_i v_j \frac{\partial}{\partial x_j} v_i + v_i \frac{\partial}{\partial x_j} \sigma_{ij} + \rho v_i f_i - \left(\frac{1}{2} v_i^2 + \phi\right) \frac{\partial}{\partial x_k} (\rho v_k) - T \frac{\partial}{\partial x_k} (\sigma v_k) + 2R \\ &- T \frac{\partial}{\partial x_k} \left(\frac{q_k}{T}\right) - \left(\frac{\partial}{\partial x_m} \sigma_{km}^{(r)}\right) v_k - \left(\frac{\partial \mathcal{U}^d}{\partial x_k}\right)_\sigma v_k - h_k \mathcal{N}_k + \partial_k \left(\Phi_{ki} \frac{\partial n_i}{\partial t} - \frac{1}{2} h_i \lambda_{ikm} v_m\right). \end{aligned} \quad (1.108)$$

Al considerar en (1.108) la derivada parcial respecto de las coordenadas de (1.21)

$$\frac{\partial \mathcal{U}}{\partial x_k} = T \frac{\partial \sigma}{\partial x_k} + \left(\frac{\partial \mathcal{U}^d}{\partial x_k}\right)_\sigma \quad (1.109)$$

con $T = \partial \mathcal{U}^0 / \partial \sigma$ y $p = T\sigma - \mathcal{U}$, se encuentra

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{1}{2} \rho v_i^2 + \rho \phi + \mathcal{U}\right) &= -\rho v_i v_j \frac{\partial v_i}{\partial x_j} + v_i \frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_j} + \rho v_i f_i - \left(\frac{1}{2} v_i^2 + \phi\right) \frac{\partial}{\partial x_k} (\rho v_k) - v_k \frac{\partial p}{\partial x_k} - \frac{\partial q_k}{\partial x_k} + 2R \\ &+ \frac{q_k}{T} \frac{\partial T}{\partial x_k} - \left(\frac{\partial}{\partial x_m} \sigma_{km}^{(r)}\right) v_k - h_i \mathcal{N}_i + \frac{\partial}{\partial x_k} \left(\Phi_{ki} \frac{\partial n_i}{\partial t} - \frac{1}{2} h_i \lambda_{ikm} v_m - T \sigma v_k\right). \end{aligned} \quad (1.110)$$

Si definimos al tensor de esfuerzos σ_{ij} como

$$\sigma_{ij} \equiv -p \delta_{ij} + \sigma'_{ij} + \sigma'_{ij}, \quad (1.111)$$

se considera $f_i = -\partial \phi / \partial x_i$ de (1.64), la ecuación de balance (1.89) junto con (1.90), así como las relaciones $-\left(\frac{1}{2} v_i^2 + \phi\right) \partial (\rho v_k) / \partial x_k = -\partial [\rho \left(\frac{1}{2} v_i^2 + \phi\right) v_k] / \partial x_k + \rho v_k \partial \left(\frac{1}{2} v_i^2 + \phi\right) / \partial x_k$ y $\partial_k \left(\sigma'_{jk} v_j\right) = \sigma'_{jk} \partial_k v_j + v_j \partial_k \sigma'_{jk}$, la expresión (1.110) toma la forma

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{1}{2} \rho v_i^2 + \rho \phi + \mathcal{U}\right) + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\frac{1}{2} \rho v_i^2 + \rho \phi\right) v_j - v_j \sigma'_{ij} + q_j + T \sigma v_j + \Phi_{ji} v_j \frac{\partial n_i}{\partial x_j} - \frac{1}{2} \Phi_{ji} \lambda_{ijk} \frac{\partial v_k}{\partial x_j} \right. \\ \left. - \Phi_{ji} \mathcal{N}_i + \frac{1}{2} h_i \lambda_{ijk} v_k \right] = 2R - \sigma'_{ij} \frac{\partial v_i}{\partial x_j} + \frac{q_k}{T} \frac{\partial T}{\partial x_k} - \mathcal{N}_k h_k. \end{aligned} \quad (1.112)$$

Por consiguiente, al comparar (1.112) con (1.94), se encuentra que la densidad de corriente de energía está dada por

$$Q_j \equiv \left(\frac{1}{2} \rho v_i^2 + \rho \phi\right) v_j - v_j \sigma'_{ij} + T \sigma v_j + q_j + \Phi_{ji} v_j \frac{\partial n_i}{\partial x_j} - \frac{1}{2} \Phi_{ji} \lambda_{ijk} \frac{\partial v_k}{\partial x_j} - \Phi_{ji} \mathcal{N}_i + \frac{1}{2} h_i \lambda_{ijk} v_k; \quad (1.113)$$

mientras que la función de disipación toma la forma

$$2R \equiv \sigma'_{ij} \frac{\partial v_i}{\partial x_j} - \frac{q_k}{T} \frac{\partial T}{\partial x_k} + \mathcal{N}_k h_k. \quad (1.114)$$

La función de disipación $2R$ dada por (1.114) puede ser interpretada como la energía (por unidad de volumen) disipada por los grados internos de libertad microscópicos del sistema. Esta función determina el incremento de entropía debido a procesos disipativos.

Si se compara el tensor de esfuerzos σ_{ij} dado por (1.111) con su definición previa (1.12), puede hacerse la identificación $\tau_{ij} = \sigma_{ij}^{(r)} + \sigma'_{ij}$. Además, respecto a (1.114), también resultan pertinentes los siguientes señalamientos. Dado que σ'_{ij} está contenido en (1.114), es claro entonces que constituye la parte disipativa (viscosa) del tensor de esfuerzos (1.111); $\sigma_{ij}^{(r)}$ también allí indicado y que recibe el nombre de parte reactiva (de allí el superíndice r), sólo constituye una contribución no disipativa (adicional a la dependiente con la presión $-p\delta_{ij}$) a dicho tensor y es completamente característica de un medio nemático. Por otra parte, el flujo de calor q_k , contenido en (1.114), forma parte de la contribución irreversible de la densidad de corriente de entropía \tilde{J}_k definida por (1.92); en esta ecuación, σv_k representa la parte reversible de esta densidad de corriente. Por último, como \mathcal{N}_k aparece en (1.114), puede entonces identificársele como la componente disipativa de la cuasicorriente Y_i dada por (1.90); en esta expresión, el efecto producido por las derivadas espaciales del campo de velocidades y el coeficiente adimensional λ , representado por el término $-\frac{1}{2}\lambda_{ijk}\partial_j v_k$, claramente es de transporte y no termodinámico, por ello ambas cantidades no son disipativas. La forma explícita de σ'_{ij} , q_k y \mathcal{N}_k será discutida en la siguiente sección.

1.6.2. Ecuación general de transferencia de calor

Resultará conveniente en cálculos posteriores formular una ecuación de balance para la densidad específica de entropía s (o densidad de entropía por unidad de masa), la cual se relaciona con la densidad volumétrica de entropía σ mediante $\sigma = \rho s$. Para hallar dicha expresión, desarrollemos nuevamente la derivada parcial del primer término del miembro izquierdo de (1.94) como

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{1}{2} \rho v_i^2 + \rho \phi + \mathcal{U} \right) = \rho v_i \frac{\partial v_i}{\partial t} + \frac{1}{2} v_i^2 \frac{\partial \rho}{\partial t} + \phi \frac{\partial \rho}{\partial t} + T \frac{\partial \sigma}{\partial t} + \frac{\partial \mathcal{U}}{\partial t}. \quad (1.115)$$

Al utilizar en la derivada respecto del tiempo de $\sigma = \rho s$, la ecuación de continuidad (1.56) y la relación $\partial(\rho s v_k)/\partial x_k = s \partial(\rho v_k)/\partial x_k + \rho v_k \partial s/\partial x_k$, se obtiene

$$\frac{\partial \sigma}{\partial t} = \rho \frac{\partial s}{\partial t} - s \frac{\partial}{\partial x_k} (\rho v_k). \quad (1.116)$$

Si se sustituye (1.116) en (1.96), se encuentra

$$\frac{\partial \mathcal{U}}{\partial t} = \rho T \frac{\partial s}{\partial t} - s T \frac{\partial}{\partial x_k} (\rho v_k) + \left(\frac{\partial \mathcal{U}^d}{\partial t} \right)_\sigma. \quad (1.117)$$

La inserción de (1.107) en (1.117) y de ésta en (1.115), permite hallar

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{1}{2} \rho v_i^2 + \rho \phi + \mathcal{U} \right) &= v_i \left(-\rho v_j \frac{\partial v_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_j} + \rho f_i \right) - \left(\frac{1}{2} v_i^2 + \phi \right) \frac{\partial}{\partial x_k} (\rho v_k) + \rho T \frac{\partial s}{\partial t} - s T \frac{\partial}{\partial x_k} (\rho v_k) \\ &\quad - \left(\frac{\partial \sigma_{km}^{(r)}}{\partial x_m} \right) v_k - \left(\frac{\partial \mathcal{U}^d}{\partial x_k} \right)_\sigma v_k - \mathcal{N}_k h_k + \partial_k \left(\Phi_{ki} \frac{\partial n_i}{\partial t} - \frac{1}{2} h_i \lambda_{ikm} v_m \right), \end{aligned} \quad (1.118)$$

en cuya deducción también se han empleado las ecuaciones de conservación de masa (1.56) y de cantidad de movimiento (1.60). Dado que $\sigma = \rho s$, (1.109) puede escribirse como

$$\frac{\partial \mathcal{U}}{\partial x_k} = T \rho \frac{\partial s}{\partial x_k} + s T \frac{\partial \rho}{\partial x_k} + \left(\frac{\partial \mathcal{U}^d}{\partial x_k} \right)_\sigma. \quad (1.119)$$

Al sustituir (1.119) en (1.118), considerar la relación $-\rho s T \partial v_k / \partial x_k = -\partial [(\rho s) T v_k] / \partial x_k + v_k \partial (\rho s T) / \partial x_k$, la ecuación (1.44) con $\sigma = \rho s$ y (1.111), se obtiene

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{1}{2} \rho v_i^2 + \rho \phi + \mathcal{U} \right) + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\frac{1}{2} \rho v_i^2 + \rho \phi \right) v_j - \sigma'_{ij} v_i + T(\rho s) v_j + q_j + \Phi_{ji} v_l \frac{\partial n_i}{\partial x_l} - \frac{1}{2} \Phi_{ji} \lambda_{ijk} \frac{\partial v_k}{\partial x_j} \right. \\ \left. - \Phi_{ji} \mathcal{N}_i + \frac{1}{2} h_i \lambda_{ijk} v_k \right] = \rho T \left(\frac{\partial s}{\partial t} + v_i \frac{\partial s}{\partial x_i} \right) - \sigma'_{ij} \frac{\partial v_i}{\partial x_j} + \frac{\partial q_j}{\partial x_j} - \mathcal{N}_k h_k. \end{aligned} \quad (1.120)$$

En la deducción de (1.120) también se han empleado las relaciones $\partial [\rho (\frac{1}{2} v_i^2 + \phi) v_k] / \partial x_k = \rho v_k \partial (\frac{1}{2} v_i^2 + \phi) / \partial x_k + (\frac{1}{2} v_i^2 + \phi) \partial (\rho v_k) / \partial x_k$, $\partial (\sigma'_{ij} v_i) / \partial x_j = v_i \partial \sigma'_{ij} / \partial x_j + \sigma'_{ij} \partial v_i / \partial x_j$, $f_i = -\partial \phi / \partial x_i$ de (1.64) y la ecuación de balance (1.89) junto con (1.90); asimismo, se ha añadido a cada miembro de la igualdad el término $\partial q_j / \partial x_j$. Finalmente, al igualar (1.120) con (1.112) y sustituir en la expresión resultante (1.114), podemos escribir

$$\rho T \left(\frac{\partial s}{\partial t} + v_i \frac{\partial s}{\partial x_i} \right) = \sigma'_{ij} \frac{\partial v_i}{\partial x_j} - \frac{\partial q_j}{\partial x_j} + \mathcal{N}_k h_k, \quad (1.121)$$

que se conoce como *ecuación general de transferencia térmica*. La interpretación de la ecuación (1.121) es la siguiente. El miembro izquierdo es la derivada temporal total ds/dt de la entropía, multiplicada por ρT . La cantidad ds/dt proporciona la tasa de cambio de entropía del elemento de fluido nemático conforme se mueve espacialmente, y $T ds/dt$ es, por consiguiente, la cantidad de calor ganado por este elemento en la unidad de tiempo, de modo que $\rho T ds/dt$ es la cantidad de calor ganada por unidad de volumen. Por lo tanto, de (1.121) se desprende que la cantidad de calor ganada por unidad de volumen es

$$\sigma'_{ij} \frac{\partial v_i}{\partial x_j} - \frac{\partial q_j}{\partial x_j} + \mathcal{N}_k h_k. \quad (1.122)$$

En (1.122) se representa la energía disipada debido a la viscosidad, mediante el primer término; al calor transferido, en el segundo; y a la variación espacial del campo director, en el tercero. Nótese que si en (1.121) no hay viscosidad, conducción térmica o variaciones espaciales del campo director, el miembro derecho es nulo y en consecuencia se obtiene la ecuación de conservación de entropía de un fluido ideal [5].

1.6.3. Variación de la entropía total

La variación de la entropía por unidad de masa está determinada por la derivada

$$\frac{d}{dt} \int \rho s dV = \int \frac{\partial}{\partial t} (\rho s) dV.$$

Al emplear la ecuación de conservación de masa (1.56) y la general de transferencia térmica (1.121) se obtiene

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho s) = \rho \frac{\partial s}{\partial t} + s \frac{\partial \rho}{\partial t} = -\rho v_i \frac{\partial s}{\partial x_i} + \frac{1}{T} \sigma'_{ij} \frac{\partial v_i}{\partial x_j} - \frac{1}{T} \frac{\partial q_j}{\partial x_j} + \frac{1}{T} h_k \mathcal{N}_k - s \frac{\partial}{\partial x_k} (\rho v_k).$$

Dado que $\partial (s \rho v_k) / \partial x_k = s \partial (\rho v_k) / \partial x_k + \rho v_k \partial s / \partial x_k$, el cambio de la entropía total está dada por

$$\frac{d}{dt} \int \rho s dV = \int \left[-\frac{\partial}{\partial x_k} (s \rho v_k) + \frac{1}{T} \sigma'_{ij} \frac{\partial v_i}{\partial x_j} - \frac{1}{T} \frac{\partial q_j}{\partial x_j} + \frac{1}{T} h_k \mathcal{N}_k \right] dV. \quad (1.123)$$

La integral de volumen del primer elemento del integrando de (1.123) se transforma en una integral de flujo de entropía $s \rho v_k$ sobre la superficie. Si se considera un volumen no acotado de fluido en reposo en el infinito,

la superficie acotada puede ser removida en esa región; consecuentemente, el integrando de la integral de superficie es cero y también lo es la integral misma. De esta manera, (1.123) se simplifica como

$$\frac{d}{dt} \int \rho s dV = \int \left(\frac{1}{T} \sigma'_{ij} \frac{\partial v_i}{\partial x_j} - \frac{1}{T} \frac{\partial q_j}{\partial x_j} + \frac{1}{T} h_k \mathcal{N}_k \right) dV. \quad (1.124)$$

Al emplear la relación $\partial (T \frac{q_k}{T}) / \partial x_k = T \partial (\frac{q_k}{T}) / \partial x_k + \frac{q_k}{T} \partial T / \partial x_k$, el segundo término del miembro derecho de (1.124) puede escribirse como

$$\int \frac{1}{T} \frac{\partial q_j}{\partial x_j} dV = \int \frac{\partial}{\partial x_k} \left(\frac{q_k}{T} \right) dV + \int \frac{q_k}{T^2} \frac{\partial T}{\partial x_k} dV. \quad (1.125)$$

Asumiendo que la temperatura del fluido tiende suficientemente rápido a un valor constante en el infinito, podemos transformar la primer integral del miembro derecho de (1.125) en una sobre una superficie remota infinita (en la cual $q_k = 0$) y en consecuencia la integral se anula. De esta manera, el cambio de entropía total puede escribirse como

$$\frac{d}{dt} \int \rho s dV = \int \frac{2R}{T} dV, \quad (1.126)$$

en donde $2R$ es la función de disipación (1.114).

1.7. Fuerzas y flujos termodinámicos

De gran interés resulta calcular la tasa de variación de la entropía de un sistema, dado que está íntimamente relacionada con un proceso irreversible cuando el sistema se aleja del estado de equilibrio. La variación temporal de la entropía total $S(t)$ puede escribirse en la forma [50], [102]

$$\frac{d}{dt} S(t) = \frac{d}{dt} \int_V \sigma dV = \int_V \frac{\partial \sigma}{\partial \bar{x}_k} \frac{d\bar{x}_k}{dt} dV \quad (1.127)$$

Si se definen los flujos $J_k \equiv d\bar{x}_k/dt$ y las fuerzas $F_k \equiv \partial \sigma / \partial \bar{x}_k$ termodinámicos (en donde \bar{x}_k es una variable extensiva por unidad de volumen), podemos escribir a (1.127) como

$$\frac{d}{dt} S(t) = \int_V \sum_k F_k J_k dV. \quad (1.128)$$

La expresión (1.128) indica que la razón de producción de entropía puede expresarse como la suma de productos de cada flujo J_k con su correspondiente afinidad (fuerza termodinámica) F_k . F_k se anula si el nemático se encuentra en el estado de equilibrio no distorsionado, y si es distinta de cero puede interpretarse como una fuerza generalizada que produce un alejamiento del sistema respecto de su estado de equilibrio, dando lugar a un proceso irreversible.

Para ciertos sistemas, los flujos termodinámicos J_k en un instante dado dependen únicamente de los valores de las afinidades F_k en ese instante. Los sistemas que cumplen con la condición anterior reciben el nombre de *puramente resistivos*. En general los sistemas son mucho más complejos ya que sus flujos termodinámicos, además de depender de los valores de las afinidades en un instante dado, también son función de éstas en tiempos previos, es decir, están afectados por efectos de memoria. Para un sistema

puramente resistivo, por definición, cada flujo local depende sólo de las afinidades locales instantáneas y de los parámetros intensivos locales. Cabe señalar que en general cada flujo no sólo es función de su correspondiente afinidad, sino también de todas las demás.

Si suponemos que el efecto de las afinidades F_j sobre un flujo dado J_k es pequeño, y dado que éste desaparece a medida que aquellas se anulan, entonces puede expresarse a J_k como un desarrollo en serie de potencias de las F_j sin término constante, es decir

$$J_k = \sum_j L_{jk} F_j + \frac{1}{2!} \sum_i \sum_j L_{ijk} F_i F_j + \dots \quad (1.129)$$

en donde $L_{jk} = (\partial J_k / \partial F_j)_0$ y $L_{ijk} = [\partial^2 J_k / (\partial F_i \partial F_j)]_0$ se denominan, respectivamente, coeficientes cinéticos de primero y segundo orden; ambos coeficientes son funciones locales de las variables intensivas del sistema. Los coeficientes cinéticos satisfacen una propiedad de simetría importante que es exhibida por el *teorema de Onsager*: si la dependencia entre flujos y afinidades termodinámicos es lineal, el efecto de la j -ésima afinidad sobre el k -ésimo flujo es idéntico al efecto producido por la k -ésima afinidad sobre el j -ésimo flujo, es decir, se cumple que

$$L_{jk} = L_{kj}, \quad (1.130)$$

que se conocen como relaciones recíprocas de Onsager. Esta propiedad será de gran importancia en la deducción posterior de algunas de las densidades de corriente nemáticas¹⁷.

Por otra parte, la variación temporal de entropía total $S(t)$ puede expresarse en términos de las variaciones de las variables hidrodinámicas nemáticas del sistema, lo que permite identificar precisamente cuáles de éstas están íntimamente asociadas con el proceso irreversible. Para ello, escribamos

$$\frac{d}{dt} S(t) = \frac{d}{dt} \int_V \sigma dV = \int_V \frac{\partial \sigma}{\partial t} dV, \quad (1.131)$$

de modo que al sustituir (1.91) en (1.131) y al emplear el teorema de la divergencia de Gauss se encuentra

$$\frac{d}{dt} S(t) = \int_V \frac{2R}{T} dV - \int_S (\sigma \vec{v}) \cdot d\vec{S} - \int_S \left(\frac{\vec{q}}{T} \right) \cdot d\vec{S}, \quad (1.132)$$

en donde $d\vec{S}$ denota a un elemento diferencial de área. Si los efectos de superficie pueden despreciarse, es decir, si $\int_S (\sigma \vec{v}) \cdot d\vec{S} = 0$ y $\int_S (\vec{q}/T) \cdot d\vec{S} = 0$, (1.132) puede expresarse finalmente como

$$\frac{d}{dt} S(t) = \int_V \frac{2R}{T} dV, \quad (1.133)$$

en donde $2R$ es la función de disipación (1.114). Cabe señalar que (1.133) coincide con (1.126); en ambas expresiones, la función de disipación $2R$ determina el incremento de entropía debido a un proceso disipativo.

De esta manera, al comparar los integrandos de (1.133) y (1.128), así como al emplear (1.114), se pueden identificar los flujos termodinámicos

$$J_k = \left\{ \sigma'_{jk}, \frac{q_k}{T}, \mathcal{N}_k \right\}, \quad (1.134)$$

¹⁷Si bien es cierto que la igualdad $L_{jk} = L_{kj}$ se cumple para sistemas isótropos, en la Subsección 1.7.1 se muestra que para un nemático, dado que exhibe simetría uniaxial, también resulta válida.

y las fuerzas termodinámicas generalizadas

$$F_k = \left\{ \frac{1}{T} \partial_k v_j, -\frac{1}{T} \partial_k T, \frac{h_k}{T} \right\}. \quad (1.135)$$

En la identificación de las fuerzas termodinámicas (1.135) se consideró el resultado previo dado por las expresiones (1.73)-(1.75). Tal como se mencionó al final de la Subsubsección 1.3.3.1, las cantidades $\partial_i T$, $\partial_j v_i$ y $\partial_j \Phi_{ij}$ (o h_i) pueden identificarse como fuerzas termodinámicas debido a que ocasionan que el sistema se aleje de su estado de equilibrio termodinámico.

Las cantidades σ'_{jk} , q_k/T y \mathcal{N}_k indicadas en (1.134), constituyen las componentes disipativas de las densidades de corriente de cantidad de movimiento (1.111) y entropía (1.92), así como la cuasicorriente (1.90), respectivamente. Podemos concluir entonces que aquellas cantidades presentes en los flujos (1.90), (1.92), (1.111) y (1.113) que no están indicadas en (1.134), no son de naturaleza disipativa y pueden considerarse como reversibles. De esta manera, resulta válido suponer que la parte dinámica de las ecuaciones hidrodinámicas consiste, desde el punto de vista de la termodinámica, de dos tipos de densidades de corrientes: reversible e irreversible, siendo esta última la que incrementa la entropía del sistema. Por consiguiente, resulta razonable separar las corrientes σ_{ij} , \tilde{J}_k , Q_j y la cuasicorriente Y_i aditivamente como $\sigma_{ij} = \sigma_{ij}^R + \sigma_{ij}^D$, $\tilde{J}_k = \tilde{J}_k^R + \tilde{J}_k^D$, $Q_j = Q_j^R + Q_j^D$ y $Y_i = Y_i^R + Y_i^D$, en donde la parte reversible (indicada con un superíndice R) está dada por

$$\sigma_{ij}^R \equiv -p\delta_{ij} + \sigma_{ij}^{(r)} = -p\delta_{ij} - \Phi_{jl}\partial_l n_i - \frac{1}{2}h_m\lambda_{imj}, \quad (1.136)$$

$$\tilde{J}_k^R \equiv \sigma v_k, \quad (1.137)$$

$$Q_j^R \equiv \left(\frac{1}{2}\rho v_i^2 + \rho\phi \right) v_j + T\sigma v_j + \Phi_{ji}v_j \frac{\partial n_i}{\partial x_j} - \frac{1}{2}\Phi_{ji}\lambda_{ijk} \frac{\partial v_k}{\partial x_j} + \frac{1}{2}h_i\lambda_{ijk}v_k, \quad (1.138)$$

$$Y_i^R \equiv -\frac{1}{2}\lambda_{ijk}\partial_j v_k, \quad (1.139)$$

y la irreversible o disipativa (denotada con el superíndice D) es

$$\sigma_{ij}^D \equiv \sigma'_{ij}, \quad (1.140)$$

$$\tilde{J}_k^D \equiv \frac{q_i}{T}, \quad (1.141)$$

$$Q_j^D \equiv -\Phi_{ji}\mathcal{N}_i - v_j\sigma'_{ij} + q_j, \quad (1.142)$$

$$Y_i^D \equiv -\mathcal{N}_i. \quad (1.143)$$

Las componentes reversibles (1.136)-(1.139) permanecen invariantes bajo la transformación $t \rightarrow -t$ (inversión temporal), así como las derivadas temporales de las correspondientes variables. Por otro lado, no todas las componentes disipativas (1.140)-(1.143) son invariantes ante tal transformación temporal.

Para completar las ecuaciones de conservación de movimiento (1.60), de balance de entropía (1.91) y del director (1.89), se requiere encontrar la forma explícita de las densidades de corriente disipativas σ'_{ij} , q_i/T y \mathcal{N}_i . Esto se realiza a continuación.

1.7.1. Densidades de corriente disipativas

Las densidades de corriente o flujos σ'_{ij} , q_i/T , \mathcal{N}_i describen procesos de relajación del sistema cuando éste se aleja del estado de equilibrio debido a la presencia de las fuerzas $(\partial_k v_j)/T$, $-(\partial_k T)/T$, h_k/T que producen distorsiones en los campos de velocidades y del director. Supóngase que los flujos en un instante dado dependen sólo de los valores de las fuerzas termodinámicas involucradas, y además, considérese que las fuerzas son lo suficientemente pequeñas de modo que podamos despreciar términos de orden superior. Por consiguiente, de acuerdo con el desarrollo (1.129) podemos escribir a los flujos como una combinación lineal de las fuerzas termodinámicas en la forma

$$\sigma'_{ij} = P'_{ijkl} \left(\frac{\partial_k v_l}{T} \right) - Q'_{ijk} \left(\frac{\partial_k T}{T} \right) + R'_{ijk} \left(\frac{h_k}{T} \right), \quad (1.144)$$

$$\frac{q_i}{T} = P^{q_i/T}_{ikl} \left(\frac{\partial_k v_l}{T} \right) - Q^{q_i/T}_{ik} \left(\frac{\partial_k T}{T} \right) + R^{q_i/T}_{ik} \left(\frac{h_k}{T} \right), \quad (1.145)$$

$$\mathcal{N}_i = P^{\mathcal{N}_i}_{ikl} \left(\frac{\partial_k v_l}{T} \right) - Q^{\mathcal{N}_i}_{ik} \left(\frac{\partial_k T}{T} \right) + R^{\mathcal{N}_i}_{ik} \left(\frac{h_k}{T} \right), \quad (1.146)$$

en donde los tensores P'_{ijkl} , Q'_{ijk} , R'_{ijk} , $P^{q_i/T}_{ikl}$, $Q^{q_i/T}_{ik}$, $R^{q_i/T}_{ik}$, $P^{\mathcal{N}_i}_{ikl}$, $Q^{\mathcal{N}_i}_{ik}$, $R^{\mathcal{N}_i}_{ik}$ son coeficientes cinéticos.

En las ecuaciones (1.144) a (1.146) no todos los acoplamientos resultan posibles, pues los efectos cruzados de diferente naturaleza tensorial no se acoplan entre sí. Esto es debido a que un flujo generalizado puede ser una función lineal de las componentes cartesianas de todas las fuerzas termodinámicas. Al ser éstas cantidades escalares, vectoriales y tensoriales, se transforman de manera diferente con respecto a reflexiones, traslaciones y rotaciones. Por consiguiente, de acuerdo con las propiedades del material en consideración los flujos no dependen de todas las fuerzas, tal como lo establece el principio de Curie¹⁸ [50], y sólo pueden acoplarse flujos y fuerzas del mismo orden tensorial, $Q'_{ijk} = R'_{ijk} = P^{q_i/T}_{ikl} = P^{\mathcal{N}_i}_{ikl} = 0$, de manera que (1.144)-(1.146) se reducen a

$$\sigma'_{ij} = P'_{ijkl} \left(\frac{\partial_k v_l}{T} \right), \quad (1.147)$$

$$\frac{q_i}{T} = -Q^{q_i/T}_{ik} \left(\frac{\partial_k T}{T} \right) + R^{q_i/T}_{ik} \left(\frac{h_k}{T} \right), \quad (1.148)$$

$$\mathcal{N}_i = -Q^{\mathcal{N}_i}_{ik} \left(\frac{\partial_k T}{T} \right) + R^{\mathcal{N}_i}_{ik} \left(\frac{h_k}{T} \right). \quad (1.149)$$

Los coeficientes cinéticos se obtienen al imponer las condiciones de simetría del flujo nemático, así como al tomar en cuenta las características de los flujos y fuerzas que involucran. Es menester advertir que en el caso de la dependencia de los flujos q_i/T y \mathcal{N}_i con las fuerzas $-(\partial_k T)/T$ y h_k/T , indicada en (1.148) y (1.149), se sugiere la presencia de efectos cruzados; empero, tales efectos no ocurren, dado que en dichos términos las propiedades de simetría respecto al intercambio de signo de n_i de los flujos y las fuerzas termodinámicos no son las mismas.

Finalmente, vale la pena enfatizar que la selección de los flujos y de las fuerzas termodinámicos no es única. Por ejemplo, en un proceso isotérmico, de Gennes [46] considera en un caso a σ'_{jk} , h_k como los flujos y

¹⁸El principio de Curie, establece que la simetría de una causa se preserva en los efectos.

a \mathcal{N}_k , $\partial_k v_j$ como las fuerzas; mientras que en otro, a σ'_{jk} , \mathcal{N}_k como los flujos y a $\partial_k T$, $\partial_k v_j$ como las fuerzas. Si bien mediante la primer elección se obtienen predicciones del formalismo de *ELP* y a través de la segunda la equivalencia entre las formulaciones de *ELP* y Harvard¹⁹, ambas opciones no resultan del todo correctas, pues presentan términos en los desarrollos en serie de potencias que proponen a los flujos como funciones de las fuerzas termodinámicas que no corresponden al mismo orden tensorial [51].

1.7.1.1. Tensor de esfuerzos viscosos

En (1.147) σ'_{ij} y $(\partial_k v_l)/T$ son invariantes ante los cambios de signo de n_i , tal como puede observarse de (1.60), (1.111) y de (1.78), pues no dependen directamente de n_i . Por consiguiente, se supondrá que la dependencia lineal entre σ'_{ij} y $(\partial_l v_m)/T$ indicada en (1.147), es

$$\sigma'_{ij} = P_{ijkl} \left(\frac{\partial_k v_l}{T} \right) = \nu_{iklm} T \left(\frac{\partial_k v_l}{T} \right), \quad (1.150)$$

en donde ν_{iklm} es un tensor de cuarto orden que debe ser también invariante respecto a n_i , y que posee las propiedades de simetría (resultantes de las propiedades de simetría de σ'_{ik} y v_{ik}), esto es, $\nu_{iklm} = \nu_{kilm} = \nu_{ikml}$. Dado que σ'_{jk} es un flujo termodinámico y $(\partial_k v_j)/T$ su correspondiente afinidad, como puede verse, respectivamente, en (1.134) y (1.135), las componentes del tensor ν_{iklm} actúan como coeficientes cinéticos L_{jk} . Puesto que la dependencia entre σ'_{jk} y $\partial_k v_j$ se ha considerado lineal, de acuerdo con el teorema de Onsager, las componentes del tensor ν_{iklm} deben satisfacer la condición $L_{jk} = L_{kj}$ indicada en (1.130), es decir, $\nu_{iklm} = \nu_{lmik}$. El tensor ν_{iklm} debe construirse a partir de la delta de Kronecker δ_{ik} y el vector director n_i tomando en cuenta todas las simetrías mencionadas. Sólo existen cinco combinaciones linealmente independientes que involucran a estas cantidades y que cumplen con tales propiedades, a saber,

$$\begin{aligned} n_i n_k n_l n_m, & \quad n_i n_l \delta_{km} + n_k n_l \delta_{im} + n_i n_m \delta_{kl} + n_k n_m \delta_{il}, \\ \delta_{il} \delta_{km} + \delta_{kl} \delta_{im}, & \quad n_i n_k \delta_{lm} + n_l n_m \delta_{ik}, & \quad \delta_{ik} \delta_{lm}. \end{aligned} \quad (1.151)$$

De acuerdo con lo anterior, ν_{iklm} debe poseer cinco componentes independientes. Puede demostrarse que el tensor de esfuerzos de cuarto orden más general que se forma con las cantidades (1.151) y que satisface las simetrías señaladas es [3], [52], [59]

$$\begin{aligned} \nu_{ijkl} = & (\nu_4 - \nu_2) \delta_{ij} \delta_{kl} + (\nu_5 - \nu_4 + \nu_2) (\delta_{ij} n_k n_l + \delta_{kl} n_i n_j) + (\nu_3 - \nu_2) (n_j n_l \delta_{ik} + n_j n_k \delta_{il} \\ & + n_i n_k \delta_{jl} + n_i n_l \delta_{jk}) + \nu_2 (\delta_{jl} \delta_{ik} + \delta_{il} \delta_{jk}) + 2(\nu_1 + \nu_2 - 2\nu_3) n_i n_j n_k n_l, \end{aligned} \quad (1.152)$$

en donde los coeficientes ν_1 , ν_2 , ν_3 , ν_4 , ν_5 tienen dimensiones de viscosidad. El orden de magnitud de este tipo de coeficientes es típicamente de $10^{-1} poise$ [46], [52]. De esta manera, la forma final que toma (1.150), es

$$\sigma'_{ij} = \nu_{ijlm} \partial_m v_l. \quad (1.153)$$

¹⁹La cual está dada a través de una ecuación análoga a (1.84).

1.7.1.2. Flujo de calor

En (1.148) q_i/T y $-(\partial_k T)/T$ son funciones pares respecto a los cambios en el signo de n_i , como puede inferirse de (1.92) y de la ecuación de conservación que se desprende de (1.91) cuando $R = 0$, pues no dependen directamente de n_i ; por otra parte, h_k/T resulta impar respecto a tal transformación, tal como se muestra en (1.40). Consecuentemente, un término de la forma $R_{ik}^{q_i/T} (h_k/T)$ es imposible, ya que por una parte $R_{ik}^{q_i/T}$ tendría que ser impar ante los cambios de signo de n_i , y por otra, al tratarse de un tensor de segundo orden, sólo las combinaciones $n_i n_l$ o δ_{km} (que son pares) son posibles; por consiguiente, $R_{ik}^{q_i/T} = 0$. De este modo, la dependencia lineal entre q_k/T y $-(\partial_k T)/T$, está dada por

$$\frac{q_i}{T} = -Q_{ik}^{q_i/T} \left(\frac{\partial_k T}{T} \right) = -\kappa_{ik} \left(\frac{\partial_k T}{T} \right), \quad (1.154)$$

en donde κ_{ik} debe ser un tensor de segundo orden que sea par respecto a los intercambios de signo de n_i . Debido a que q_i/T es un flujo de entropía y $-(\partial_k T)/T$ su correspondiente afinidad, tal como se ilustra respectivamente en (1.134) y (1.135), las componentes del tensor κ_{ik} actúan como coeficientes cinéticos L_{jk} . Puesto que la dependencia entre q_i/T y $-(\partial_k T)/T$ es lineal, el teorema de Onsager establece que las componentes del tensor κ_{ik} deben satisfacer la condición $L_{jk} = L_{kj}$ mostrada en (1.130), es decir, $\kappa_{ik} = \kappa_{ki}$. Por otra parte, dado que el medio nemático es uniaxial, puede demostrarse que el tensor de segundo orden κ_{ik} más general que permanece invariante ante el intercambio de sus índices y que cumple con las propiedades del director, es

$$\kappa_{ij} = \kappa_{\perp} \delta_{ij}^{\perp} + \kappa_{\parallel} n_i n_j, \quad (1.155)$$

que recibe el nombre de tensor de conductividad térmica. En (1.155) κ_{\perp} y κ_{\parallel} son las conductividades térmicas perpendicular y paralela respecto a la orientación del campo director. Los órdenes de magnitud de las conductividades térmicas generalmente son de 10^4 erg/s cm K [46], [52]. Por lo tanto, de (1.154) se desprende que

$$q_i = -\kappa_{ik} \partial_k T, \quad (1.156)$$

en donde el signo negativo indica que el calor debe fluir de una región de mayor temperatura a otra de menor temperatura, es decir, su flujo tiene que ser opuesto a la dirección del gradiente de temperaturas. La expresión (1.156) constituye la generalización de la ley de propagación del calor de Fourier para medios anisótropos con simetría uniaxial.

1.7.1.3. Cuasicorriente del director

En (1.149) \mathcal{N}_i y h_k/T son funciones impares respecto a los cambios en el signo de n_i , tal como puede verse de (1.89) y (1.90), pues dependen explícitamente de n_i ; mientras que $-(\partial_k T)/T$ no lo es, ya que es par ante dicha transformación. Por consiguiente, un término de la forma $Q_{ik}^{\mathcal{N}_i} (\partial_k T)/T$ no tiene sentido, pues debería de ser impar respecto a los cambios de signo de n_i ; esto no sucede, dado que al ser un tensor de segundo orden, sólo podría formarse con combinaciones de $n_i n_l$ o δ_{km} que son pares y, por lo tanto, $Q_{ik}^{\mathcal{N}_i} = 0$.

De esta manera, la dependencia lineal entre \mathcal{N}_i y h_k/T está dada por

$$\mathcal{N}_i = R_{ik}^{\mathcal{N}_i} \left(\frac{h_k}{T} \right) = T \alpha_{ik} \left(\frac{h_k}{T} \right), \quad (1.157)$$

en donde el tensor α_{ik} debe ser invariante respecto a cambios de signo de n_i . Puesto que α_{ik} es de segundo orden, debe estar constituido por una combinación de $n_i n_l$ o δ_{km} . Dado que \mathcal{N}_i es un flujo termodinámico y h_k su correspondiente afinidad, como se ilustra en (1.134) y (1.135), respectivamente, las componentes del tensor α_{ik} actúan como coeficientes cinéticos L_{jk} . Ya que la dependencia entre \mathcal{N}_i y h_k/T es lineal, el teorema de Onsager establece que las componentes del tensor α_{ik} deben satisfacer la condición $L_{jk} = L_{kj}$ mostrada en (1.130), esto es, $\alpha_{ik} = \alpha_{ki}$. Puede demostrarse que el tensor de segundo orden más general que cumple con los requerimientos señalados con anterioridad es

$$\alpha_{ik} = \frac{1}{\gamma_1} \delta_{ik}^\perp \equiv \frac{1}{\gamma_1} (\delta_{ik} - n_i n_k), \quad (1.158)$$

en donde γ_1 es un coeficiente de proporcionalidad que tiene las dimensiones de viscosidad y que se denomina viscosidad de torsión. El orden de magnitud de γ_1 usualmente es de 10^{-2} a 10^{-1} *poises* [46]. Por lo tanto, (1.157) puede escribirse finalmente como

$$\mathcal{N}_i = \frac{1}{\gamma_1} \delta_{ik}^\perp h_k. \quad (1.159)$$

Es importante señalar que el vector \mathcal{N}_i establecido por (1.159), como todos los términos de (1.83), también satisface la condición $n_i (dn_i/dt) = 0$, debido a que $n_i^2 = 1$ es una constante.

Al tomar en consideración la forma de las densidades de corriente disipativas (1.153), (1.156) y (1.159), se tiene entonces que la expresión más general para la función de disipación $2R$ dada en (1.114) es

$$2R = \frac{1}{\gamma_1} h_i \delta_{ij}^\perp h_j + \nu_{ijkl} (\partial_j v_i) (\partial_l v_k) + \frac{1}{T} \kappa_{ij} (\partial_i T) (\partial_j T), \quad (1.160)$$

la cual está de acuerdo con los requerimientos de simetría ($n_i \rightarrow -n_i$) del sistema nemático. Debido a que la producción de entropía se incrementa siempre durante un proceso irreversible $R > 0$, los coeficientes $\nu_1, \nu_2, \nu_3, \nu_5, \kappa_\perp, \kappa_\parallel$ y γ_1 deben ser positivos y cumplirse que $\nu_2 \nu_5 > \nu_4^2$ [59].

Finalmente, comentaremos que un cristal líquido nemático es un medio que posee en total nueve coeficientes cinéticos: cinco viscosos $\nu_1, \nu_2, \nu_3, \nu_4, \nu_5$, dos conductividades térmicas $\kappa_\perp, \kappa_\parallel$, un coeficiente de viscosidad rotacional γ_1 y un coeficiente adimensional λ , además de tres estáticos o elásticos K_1, K_2 y K_3 . El parámetro de transporte (reversible) adimensional λ no existe en los fluidos simples y es característico de los sistemas que presentan rompimiento de simetría rotacional. Cabe mencionar que en el tratamiento realizado por Leslie y Ericksen, en donde no se realiza una distinción entre las contribuciones termodinámicas reversible e irreversible, dicho parámetro λ se obtiene no de uno sino de dos coeficientes de viscosos de torsión γ_1 y γ_2 mediante el cociente $\lambda \equiv -\gamma_1/\gamma_2$ [46].

1.8. Ecuaciones nematodinámicas

El conjunto de ecuaciones nematodinámicas ha quedado completamente determinado. En esta sección, a manera de resumen, se señalan las ecuaciones que lo conforman y se considerarán en los capítulos siguientes,

así como de las cantidades relevantes que a su vez éstas involucran.

La dinámica del sistema nemático queda descrita por las ecuaciones de continuidad, la de conservación de la cantidad de movimiento, la de balance del director, y finalmente una más que puede seleccionarse de entre las ecuaciones de conservación de la densidad de energía, de balance para la densidad de entropía o de transferencia térmica. Es preciso enfatizar que las ecuaciones de conservación de la densidad de energía y de balance de la densidad de entropía no son independientes, puesto que están íntimamente ligadas a través de la función de disipación $2R$ que se dedujo tomando en consideración a ambas. Como variables hidrodinámicas del nemático se seleccionarán a sus densidades volumétrica de entropía σ , de masa ρ , de cantidad de movimiento ρv_i , la temperatura T , la presión p y al director n_i . Por consiguiente, su evolución está determinada completamente por las ecuaciones de continuidad o de conservación de masa (1.57)

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + v_j \partial_j\right) \rho + \rho \partial_l v_l = 0, \quad (1.161)$$

así como las de balance de la cantidad de movimiento (1.60)

$$\rho \left(\frac{\partial}{\partial t} + v_j \partial_j\right) v_i - \partial_j \sigma_{ij} = \rho f_i, \quad (1.162)$$

de la densidad volumétrica de entropía (1.91)

$$\frac{\partial}{\partial t} \sigma + \partial_j \left(\sigma v_j + \frac{q_j}{T}\right) = \frac{2R}{T} \quad (1.163)$$

y del director (1.89)

$$\frac{\partial n_i}{\partial t} + v_j \partial_j n_i + Y_i = 0. \quad (1.164)$$

En (1.162) f_i es la resultante de todas las fuerzas volumétricas externas por unidad de masa que actúan sobre el fluido nemático que se supondrá puede escribirse, de acuerdo con (1.64), como $f_i = -\partial\phi/\partial x_i$ en donde ϕ un potencial independiente del tiempo. Además, en (1.163) la función de disipación $2R$, considerando (1.160), está dada por

$$2R = \frac{1}{\gamma_1} h_i \delta_{ij}^\perp h_j + \nu_{ijkl} (\partial_j v_i) (\partial_l v_k) + \frac{1}{T} \kappa_{ij} (\partial_i T) (\partial_j T). \quad (1.165)$$

Asimismo, en las ecuaciones nematodinámicas (1.162) a (1.164) pueden identificarse los flujos

$$\sigma_{ij} \equiv -p \delta_{ij} - \Phi_{jl} \partial_i n_l - \frac{1}{2} \lambda_{imj} h_m + \sigma'_{ij}, \quad (1.166)$$

$$q_i = -\kappa_{ij} \partial_j T, \quad (1.167)$$

$$Y_i \equiv -\frac{1}{2} \lambda_{ijk} \partial_j v_k - \mathcal{N}_i; \quad (1.168)$$

específicamente, éstos son, el tensor de esfuerzos σ_{ij} , obtenido al sustituir (1.102) en (1.111), el flujo de calor q_i , dado por (1.156), y la cuasicorriente Y_i , determinada por (1.90).

En (1.165) el campo molecular transversal h_i se define en términos del campo director n_i y sus derivadas por medio de la relación (1.40)

$$h_i = \delta_{ir}^\perp K_{rjkl} \partial_j \partial_l n_k - \delta_{iq}^\perp \left(\frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial n_q} K_{pjkl} - \frac{\partial}{\partial n_p} K_{qjkl} \right) \partial_j n_p \partial_l n_k, \quad (1.169)$$

en la que $\delta_{ik}^\perp = \delta_{ik} - n_i n_k$ es la delta de Kronecker de proyección; el tensor viscoso uniaxial ν_{ijkl} , que de acuerdo con (1.152), está dado por

$$\begin{aligned} \nu_{ijkl} = & \nu_2(\delta_{jl}\delta_{ik} + \delta_{il}\delta_{jk}) + 2(\nu_1 + \nu_2 - 2\nu_3)n_i n_j n_k n_l + (\nu_3 - \nu_2)(n_j n_l \delta_{ik} + n_j n_k \delta_{il} \\ & + n_i n_k \delta_{jl} + n_i n_l \delta_{jk}) + (\nu_4 - \nu_2)\delta_{ij}\delta_{kl} + (\nu_5 - \nu_4 + \nu_2)(\delta_{ij}n_k n_l + \delta_{kl}n_i n_j), \end{aligned} \quad (1.170)$$

en donde $\nu_1, \nu_2, \nu_3, \nu_4, \nu_5$ son coeficientes de viscosidad; así como del tensor de conductividad térmica uniaxial κ_{ij} , que según (1.155), se escribe en la forma

$$\kappa_{ij} = \kappa_\perp \delta_{ij} + \kappa_a n_i n_j, \quad (1.171)$$

en la cual $\kappa_a = \kappa_\parallel - \kappa_\perp$ es la conductividad térmica anisótropa, siendo κ_\parallel y κ_\perp las conductividades térmicas paralela y perpendicular con respecto a la orientación del campo director. Además, (1.169) está definida en términos del tensor

$$K_{ijkl} = K_1 \delta_{ij} \delta_{kl} + K_2 n_p \epsilon_{pij} n_q \epsilon_{qkl} + K_3 n_j n_l \delta_{ik} \quad (1.172)$$

en el que K_1, K_2, K_3 son los coeficientes elásticos splay, twist y bend, respectivamente, y ϵ_{ijk} es el tensor de Levi-Civita.

En (1.166) p es la presión termodinámica (hidrostática); Φ_{ki} es la fuerza termodinámica generalizada, que de acuerdo con (1.36), está dada por

$$\Phi_{ki} = K_{ikrj} \partial_j n_r; \quad (1.173)$$

el tensor λ_{kji} , al considerar (1.82), se escribe como

$$\lambda_{kji} = (\lambda - 1)\delta_{kj}^\perp n_i + (\lambda + 1)\delta_{ki}^\perp n_j, \quad (1.174)$$

en donde λ es un coeficiente adimensional; mientras que σ'_{ij} , según (1.153), toma la forma

$$\sigma'_{ij} = \nu_{ijlm} \partial_m v_l. \quad (1.175)$$

Adicionalmente, en (1.168) el término \mathcal{N}_i , de acuerdo con (1.159), está dado por

$$\mathcal{N}_i = \frac{1}{\gamma_1} \delta_{ik}^\perp h_k, \quad (1.176)$$

en donde γ_1 es un coeficiente de viscosidad rotacional.

Es importante señalar que también se utilizará como parte del conjunto de ecuaciones que determinan la evolución de un nemático, en vez de (1.163), a la ecuación para la densidad másica de entropía s dada por (1.121), dada como

$$\rho T \left(\frac{\partial s}{\partial t} + v_i \frac{\partial s}{\partial x_i} \right) = \sigma'_{ij} \frac{\partial v_i}{\partial x_j} - \frac{\partial q_j}{\partial x_j} + \mathcal{N}_k h_k. \quad (1.177)$$

Por último, mencionaremos que la evolución espacial y temporal de un cristal líquido nemático está completamente determinada por el sistema de ecuaciones (1.161) a (1.164) (o el formado por las ecuaciones

(1.161) a (1.163) junto con la (1.177)). Este sistema consiste de ocho ecuaciones: dos que provienen de las escalares de continuidad y de balance de densidad volumétrica de entropía (o la de densidad específica de entropía), y seis que se desprenden de las vectoriales de conservación de la cantidad de movimiento y de balance del director. Además, en dichas ecuaciones se tienen diez variables hidrodinámicas: cuatro escalares ρ , σ (o s), T , p y dos vectoriales v_i , n_i que contienen cada una a su vez tres componentes escalares. Con la finalidad de tener un conjunto cerrado de ecuaciones hidrodinámicas, se requiere tomar en consideración a dos ecuaciones de estado que pongan a cualesquiera dos de las cuatro variables hidrodinámicas escalares en términos de las otras dos restantes. Es preciso señalar que para tener una descripción completa del sistema nemático, resta solamente conocer los valores de sus nueve coeficientes cinéticos y de los tres estáticos señalados al final de la sección anterior que aparecen en las ecuaciones constitutivas. Tales cantidades pueden determinarse a través de experimentos o mediante teorías microscópicas.

Capítulo 2

Nematodinámica fluctuante

2.1. Introducción

La teoría hidrodinámica de cristales líquidos nemáticos termótropos presentada en el capítulo anterior, ha sido desarrollada siguiendo un enfoque macroscópico y determinista. Esto significa que las variables de estado que caracterizan a estos sistemas presentan valores bien definidos, los cuales evolucionan de acuerdo a un conjunto (determinista) de ecuaciones diferenciales parciales no lineales. Dado que ha sido necesario describir procesos promedio muy complicados de la dinámica de muchos cuerpos que ocurren a nivel microscópico o molecular, es de esperarse entonces que las variables nematodinámicas fluctúen, es decir, que experimenten desviaciones aleatorias espontáneas ocasionadas por las excitaciones térmicas de las moléculas tanto espaciales como temporales.

Tal como se comentó en la introducción general, el marco teórico adecuado para realizar la descripción de las fluctuaciones de un sistema hidrodinámico, es a través de la teoría propuesta por Fox y Uhlenbeck [6], [53]. El antecedente directo de ésta puede encontrarse en la formulación que Onsager y Machlup [9] hacen de las leyes de la termodinámica de no equilibrio. En su deducción, ellos suponen que las variables macroscópicas que describen el estado de un sistema de n componentes da lugar a un proceso estocástico estacionario, gaussiano y markoviano; específicamente, consideran que dichas variables son funciones pares en el tiempo. No obstante, en su análisis, Fox y Uhlenbeck prescindieron de esta consideración, lo que da lugar a un formalismo más general de procesos estocásticos estacionarios gaussianos y markovianos para este tipo de sistemas. Como consecuencia, esta teoría es aplicable a la descripción de las fluctuaciones en un fluido simple (cuyas variables hidrodinámicas no presentan la misma simetría de inversión temporal), lo cual sugiere que sus ecuaciones de Navier-Stokes requieren términos fluctuantes adicionales como los que propusieron por primera vez Landau y Lifshitz [5]. De esta manera, es de esperarse que la teoría de Fox y Uhlenbeck también pueda aplicarse a la hidrodinámica de cristales líquidos nemáticos y resulte así posible conseguir un formalismo bien fundamentado y sistemático para estudiar las fluctuaciones de sus variables hidrodinámicas, y por ende, el mecanismo que permita calcular las funciones de correlación y formular consistentemente sus

correspondientes relaciones de fluctuación-disipación.

2.2. Teoría de Fox y Uhlenbeck

Denotemos como $\bar{a}(t)$ a un proceso estocástico multivariado $\bar{a}_1(t), \bar{a}_2(t), \dots, \bar{a}_n(t)$ que será representado por el vector columna $\bar{a}_i(t)$. Estas cantidades pueden representar las desviaciones aleatorias de las variables de un sistema físico respecto a su estado de equilibrio termodinámico, de manera que alejadas ligeramente de dicho estado son pequeñas y en éste son cero. La entropía del sistema, que es máxima en equilibrio, cerca del equilibrio puede representarse por medio del desarrollo en serie de potencias cuadrático

$$S(\bar{a}_1, \bar{a}_2, \dots, \bar{a}_n) = S_0 - \frac{1}{2} k_B \bar{a}_i \bar{E}_{ij} \bar{a}_j, \quad (2.1)$$

en donde S_0 es un valor constante de la entropía en el estado de equilibrio, k_B es la constante de Boltzmann y

$$\bar{E}_{ij} = \frac{1}{k_B} \left(\frac{\partial^2 S}{\partial \bar{a}_i \partial \bar{a}_j} \right)_{eq} \quad (2.2)$$

es una matriz simétrica definida positiva evaluada en equilibrio.

Un proceso aleatorio se describe en términos de una jerarquía de distribuciones de probabilidad, de las cuales la primera $W_1(\bar{a}, t)$ es la distribución de probabilidad de un tiempo. Un proceso estocástico $\bar{a}(t)$ es estacionario si todas sus funciones conjuntas de distribución de probabilidad, son invariantes en el tiempo. Como consecuencia, $W_1(\bar{a}, t)$ es independiente de t y la probabilidad condicional $P_2(\bar{a}', t' | \bar{a}'', t'')$ depende del tiempo sólo a través de $t'' - t'$.

En proceso $\bar{a}_i(t)$ es gaussiano, si todas sus funciones de distribución son gaussianas. Esto significa que $W_1(\bar{a}_i)$ y $P_2(\bar{a}_i | \bar{a}'_i, t)$ deben ser de la forma¹

$$W_1(\bar{a}_i) = W_0 \exp \left(-\frac{1}{2} \bar{a}_i \bar{E}_{ij} \bar{a}_j \right) \quad (2.3)$$

y

$$P_2(\bar{a}_i | \bar{a}'_i, t) = P_0 \exp \left[-\frac{1}{2} \bar{a}_i \hat{A}_{ij}(t) \bar{a}_j - \bar{a}_i \hat{B}_{ij}(t) \bar{a}'_j - \frac{1}{2} \bar{a}'_i \hat{C}_{ij}(t) \bar{a}'_j \right], \quad (2.4)$$

en donde \bar{E}_{ij} es la matriz (2.2), \hat{A}_{ij} y \hat{C}_{ij} son matrices simétricas definidas positivas que dependen de t , y \hat{B}_{ij} es una matriz también dependiente de t sin alguna propiedad especial de simetría. Las distribuciones (2.3) y (2.4) satisfacen las condiciones de normalización

$$\int W_1(\bar{a}_i) d\bar{a}_i = 1 \quad (2.5)$$

y

$$\int P_2(\bar{a}_i | \bar{a}'_i, t) d\bar{a}'_i = 1, \quad (2.6)$$

¹La ecuación (2.3) se obtiene de la fórmula de Boltzmann $S = k_B \ln W_1(\bar{a}_i) + S_0$.

en donde W_0, P_0 son constantes de normalización con valores respectivos $W_0^2 = \|\overline{E}_{ij}\| / (2\pi)^n$ y $P_0^2 = \|\widehat{C}_{ij}\| / (2\pi)^n$, siendo $\|\overline{E}_{ji}\|$ y $\|\widehat{C}_{ji}\|$ los determinantes de las matrices \overline{E}_{ij} y \widehat{C}_{ij} . Dado que P_2 debe satisfacer la condición de normalización (2.6), tiene entonces que ser de la forma

$$P_2(\overline{a}_i | \overline{a}'_i, t) = P_0 \exp \left[-\frac{1}{2} \left(\overline{a}'_i - \overline{a}_k \widehat{D}_{ki} \right) \widehat{C}_{ij} \left(\overline{a}'_j - \widehat{D}_{jl} \overline{a}_l \right) \right], \quad (2.7)$$

en donde $\left(\widehat{D}_{ik} \overline{a}_k \right)^\dagger = \left(\overline{a}_k^\dagger \widehat{D}_{ik}^\dagger \right) = \overline{a}_k \widehat{D}_{ki}$, denotando el superíndice \dagger la transpuesta. De esta manera, al comparar los argumentos de las exponenciales de (2.4) y (2.7), podemos escribir a \widehat{A}_{ij} y \widehat{B}_{ij} en términos de \widehat{C}_{ij} y \widehat{D}_{ij} como

$$\widehat{A}_{ij} = \widehat{D}_{ki} \widehat{C}_{kl} \widehat{D}_{lj} \quad \text{y} \quad \widehat{B}_{ij} = -\widehat{D}_{ki} \widehat{C}_{kj}. \quad (2.8)$$

A partir de la condición

$$\int W_1(\overline{a}_i) P_2(\overline{a}_i | \overline{a}'_i, t) d\overline{a}_i = W_1(\overline{a}'_i), \quad (2.9)$$

puede demostrarse que

$$\widehat{C}_{ij}^{-1} = \overline{E}_{ij}^{-1} - \widehat{D}_{ik} \overline{E}_{kl}^{-1} \widehat{D}_{jl}, \quad (2.10)$$

en donde $\widehat{D}_{ij}^\dagger = \widehat{D}_{ji}$. Por consiguiente, P_2 queda completamente determinada por las dos matrices \overline{E}_{ij} y \widehat{D}_{ij} [6]. La forma de P_2 en (2.7) implica que el promedio de la variable \overline{a}'_i condicionado a los valores iniciales de \overline{a}_i , puede escribirse como

$$\langle \overline{a}'_i \rangle^{\overline{a}_i} = \int \overline{a}'_i P_2(\overline{a}_i | \overline{a}'_i, t) d\overline{a}'_i = \widehat{D}_{ij}(t) \overline{a}_j. \quad (2.11)$$

Un proceso estacionario gaussiano arbitrario es markoviano, si satisface la ecuación de Chapman-Kolmogorov [110]

$$P_2(\overline{a}'_i | \overline{a}''_i, t) = \int P_2(\overline{a}'_i | \overline{a}_i, t-s) P_2(\overline{a}_i | \overline{a}''_i, s) d\overline{a}_i, \quad (2.12)$$

en donde $0 < s < t$. Entonces $\overline{a}_i(t)$ debe satisfacer (2.12), y de (2.11) se tiene

$$\begin{aligned} \widehat{D}_{ij}(t) \overline{a}_j &= \int \int \overline{a}'_i P_2(\overline{a}_i | \overline{a}''_i, t-s) P_2(\overline{a}'_i | \overline{a}_i, s) d\overline{a}'_i d\overline{a}_i, \\ &= \int P_2(\overline{a}_i | \overline{a}''_i, t-s) D_{ij}(s) \overline{a}''_j d\overline{a}''_i = \widehat{D}_{ik}(s) \widehat{D}_{kj}(t-s) \overline{a}_j, \end{aligned} \quad (2.13)$$

de donde

$$\widehat{D}_{ij}(t) = \widehat{D}_{ik}(s) \widehat{D}_{kj}(t-s). \quad (2.14)$$

La solución de (2.14), se obtiene a través de la relación de Doob [6], $\widehat{D}_{ij}(t) = \exp(-\overline{G}_{ij}t)$, en la cual \overline{G}_{ij} es una matriz independiente del tiempo sin una propiedad de simetría en particular. La sustitución de esta relación en (2.11) conduce a la regresión para el promedio de las variables aleatorias

$$\frac{d}{dt} \langle \overline{a}'_i \rangle^{\overline{a}_i} = -\overline{G}_{ij} \langle \overline{a}'_j \rangle^{\overline{a}_j}. \quad (2.15)$$

La ecuación anterior indica la forma que deben tener las *ecuaciones de regresión* para las variables aleatorias promediadas para todo proceso estacionario, gaussiano y markoviano. Con la finalidad de garantizar la descripción alrededor del equilibrio, \overline{G}_{ij} debe poseer eigenvalores con partes reales positivas. Sin embargo,

para aplicaciones posteriores, bastará con considerar que \overline{G}_{ij} es no singular y puede escribirse como la suma de una matriz simétrica \overline{S}_{ij} y otra antisimétrica \overline{A}_{ij} , $\overline{G}_{ij} = \overline{A}_{ij} + \overline{S}_{ij}$, siendo positivo al menos alguno de los eigenvalores de \overline{S}_{ij} . Así, eliminando los promedios en (2.15), y añadir aditivamente las fuerzas estocásticas F_i , puede considerarse como una ecuación generalizada de Langevin de la forma

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}\overline{a}_i(t) &= -\overline{G}_{ij}\overline{a}_j(t) + \overline{F}_i(t) \\ &= -(\overline{A}_{ij} + \overline{S}_{ij})\overline{a}_j(t) + \overline{F}_i(t). \end{aligned} \quad (2.16)$$

Supondremos que las fuerzas estocásticas $F_i(t)$ son ruido blanco (estacionarias y gaussianas) con promedio cero

$$\langle \overline{F}_i(t) \rangle = 0 \quad (2.17)$$

y correlación

$$\langle \overline{F}_i(t)\overline{F}_j(s) \rangle = 2\overline{Q}_{ij}\delta(t-s), \quad (2.18)$$

en donde \overline{Q}_{ij} una matriz simétrica y definida positiva. Es preciso señalar que en la ecuación estocástica (2.16), si se interpreta a las desviaciones \overline{a}_i como las fluctuaciones de las variables de un sistema físico respecto a su estado de equilibrio termodinámico, de acuerdo con la hipótesis de regresión de Onsager², la matriz de coeficientes \overline{G}_{ij} debe estar relacionada con los parámetros disipativos de dicho sistema.

La solución formal de (2.16) está dada por

$$\overline{a}_i(t) = \exp(-\overline{G}_{ij}t)\overline{a}_j(0) + \int_0^t \exp[-\overline{G}_{ij}(t-s)]\overline{F}_j(s)ds. \quad (2.19)$$

La estadística de las condiciones iniciales, $\overline{a}_i(0)$, queda determinada por la distribución de equilibrio (2.3). Por consiguiente, de (2.18) se desprende que el primer momento de $\overline{a}_i(t)$ es

$$\langle \overline{a}_i(t) \rangle = \exp(-\overline{G}_{ij}t)\overline{a}_j(0),$$

de modo que en el estado de equilibrio $\langle \overline{a}_i(t) \rangle^{eq} = 0$. Mediante el cálculo de la matriz de autocorrelación para dos tiempos t' y t'' (con $t'' > t'$) de la variable $\overline{a}_i(t)$ promediada en el equilibrio, es decir, $\chi_{ij}(t'' - t') \equiv \langle \overline{a}_i(t'')\overline{a}_j(t') \rangle^{eq}$, el empleo de las relaciones (2.17), (2.18) y (2.3), puede mostrarse [53] que, para un proceso estacionario, las matrices \overline{E}_{ij} , \overline{G}_{ij} y \overline{Q}_{ij} están relacionadas entre sí mediante la expresión

$$2\overline{Q}_{ij} = \overline{G}_{ik}\overline{E}_{kj}^{-1} + \overline{E}_{il}^{-1}\overline{G}_{jl}, \quad (2.20)$$

en la cual $\overline{G}_{ij}^\dagger = \overline{G}_{ji}$. La relación (2.20) recibe el nombre de teorema de fluctuación-disipación.

La expresión (2.20) indica que para obtener a la matriz \overline{Q}_{ij} (de las correlaciones de las fuerzas estocásticas F_i), se requieren conocer las matrices \overline{G}_{ij} y \overline{E}_{ij} . Si las \overline{a}_i representan las fluctuaciones de las variables de un sistema físico respecto al estado de equilibrio, entonces, de acuerdo con (2.16), \overline{G}_{ij} está relacionada con los

²La hipótesis de regresión de Onsager, establece que la dinámica de las fluctuaciones de las variables de un sistema físico, está gobernada por las mismas leyes dinámicas linealizadas que describen su proceso macroscópico.

parámetros disipativos de ese sistema; mientras que \overline{E}_{ij} , puede obtenerse, en principio, de la comparación entre la ley de producción de entropía (1.133) con la derivada respecto al tiempo de (2.1). Esta forma particular de hallar a \overline{E}_{ij} , sugiere que ésta también debe depender de los parámetros disipativos del sistema en consideración. Por lo tanto, en esta situación, el teorema de fluctuación-disipación (2.20) claramente relaciona a las fuerzas estocásticas \overline{Q}_{ij} con sus parámetros disipativos \overline{G}_{ij} y \overline{E}_{ij} . Cabe señalar, que la sustitución directa de (2.20) en (2.18) permite escribir explícitamente a las correlaciones de las fuerzas estocásticas en términos de los parámetros disipativos del sistema. Además, puede mostrarse que la matriz de autocorrelación $\chi_{ij}(t'' - t')$, al considerar (2.20), se escribe como

$$\chi_{ij}(t'' - t') = \exp [-(t'' - t') \overline{G}_{ik}] \overline{E}_{kj}^{-1}, \quad (2.21)$$

que claramente es estacionaria.

2.2.1. Respecto a la formulación de Onsager-Machlup

Resulta pertinente mencionar que el formalismo de Fox y Uhlenbeck aquí mostrado, que conduce al teorema de fluctuación-disipación (2.20), es más general que el propuesto por Onsager y Machlup. En este último todas las variables aleatorias, denotadas como $\overline{a}_i(t)$, son funciones pares del tiempo y su evolución está determinada por la ecuación de regresión

$$\frac{d}{dt} \overline{a}_i = L_{ij} X_j(t) + \overline{F}_i(t) = k_B L_{ij} \overline{E}_{jk} \overline{a}_k + \overline{F}_i(t), \quad (2.22)$$

en donde L_{ij} es la matriz de acoplamiento de fuerzas y flujos, y $X_i(t) = \partial S / \partial \overline{a}_i = -k_B \overline{E}_{ij} \overline{a}_j$ son las fuerzas termodinámicas. Obsérvese que (2.22) es un caso particular de (2.16) en el que $\overline{G}_{ij} = k_B L_{ik} \overline{E}_{kj}$. Además, (2.21) toma la forma

$$\chi_{ij}(t'' - t') = \exp [-(t'' - t') k_B L_{ik} \overline{E}_{kl}] \overline{E}_{lj}^{-1}. \quad (2.23)$$

Al imponer la condición de reversibilidad microscópica, que es equivalente a

$$\chi_{ij}(t'' - t') = \chi_{ji}(t'' - t'), \quad (2.24)$$

y utilizar en ésta (2.23), se obtiene la identidad

$$-k_B L_{ik} \overline{E}_{kl} \overline{E}_{lj}^{-1} = \dot{\chi}_{ij}(0) = \dot{\chi}_{ji}(0) = -k_B L_{jk} \overline{E}_{kl} \overline{E}_{li}^{-1} \quad (2.25)$$

o

$$L_{ij} = L_{ji}, \quad (2.26)$$

que son las relaciones recíprocas de Onsager (1.130). En términos generales (2.24) no se cumple, pues de ésta se desprende el análogo de (2.25), $\overline{G}_{il} \overline{E}_{lj}^{-1} = \left(\overline{G}_{il} \overline{E}_{lj}^{-1} \right)^\dagger = \overline{E}_{jl}^{-1} \overline{G}_{li}$ (con $\overline{G}_{il}^\dagger = \overline{G}_{li}$), el cual no siempre se satisface.

El formalismo de Onsager y Machlup fue aplicado con éxito al estudio de las conducciones de calor y eléctrica, la difusión y la cinética de las reacciones químicas. No obstante, la teoría de Fox y Uhlenbeck,

en la que las $\bar{a}_i(t)$ pueden ser pares o impares respecto al tiempo o incluso ambas a la vez, representa una generalización de aquel. Esta ampliación ha permitido llevar a cabo otro tipo de análisis, como el movimiento browniano de un oscilador armónico, las fluctuaciones hidrodinámicas en un fluido simple y la ecuación de Boltzmann fluctuante [6]. Más aún, tal como se mostrará en la siguiente sección, la hidrodinámica fluctuante de cristales líquidos nemáticos termótropos también es un caso particular, altamente no trivial, de la teoría general de procesos estocásticos de Fox y Uhlenbeck.

2.3. Nematodinámica fluctuante

A continuación aplicaremos el formalismo desarrollado en la sección anterior a un cristal líquido nemático termótropo. Primero se escribirán las ecuaciones de conservación y de balance nemáticas en términos de las desviaciones de sus variables hidrodinámicas respecto del estado de equilibrio y se linealizarán en términos de éstas hasta primer orden. Posteriormente se escribirán las variables de estado en términos de un nuevo conjunto de variables con la misma dimensión, y finalmente, se hallará a la matriz \bar{E}_{ij} a través de la comparación de la variación temporal de la entropía proveniente de la distribución gaussiana de probabilidades con la ley de producción de entropía; esto permitirá el cálculo de \bar{Q}_{ij} y, por consiguiente, el de las relaciones de fluctuación-disipación correspondientes.

2.3.1. Ecuaciones nemáticas lineales fluctuantes

Las ecuaciones de conservación y de balance (1.161)-(1.163) son completamente generales y apropiadas para determinar la evolución de un cristal líquido nemático termótropo. Por consiguiente, en esa forma son válidas para describir cualquier movimiento, incluyendo los cambios aleatorios producidos por las desviaciones que experimentan sus variables hidrodinámicas en cualquier estado en el que se encuentre. En este sentido las desviaciones de las variables de estado se convierten en sus fluctuaciones. En un punto \vec{r} y al instante t , la densidad ρ , velocidad de flujo v_i , campo director n_i , presión p , temperatura T y densidad de entropía σ , deben interpretarse, respectivamente, como la suma de los valores ρ_0 , v_i^0 , n_i^0 , p_0 , T_0 y σ_0 en el estado de referencia y sus desviaciones $\delta\rho$, δv_i , δn_i , δp , δT y $\delta\sigma$ alrededor de dicho estado. Considerando que el estado de referencia es el de equilibrio termodinámico³, ρ_0 , n_i^0 , p_0 , T_0 y σ_0 permanecen constantes, y $v_i^0 = 0$, por lo que podemos escribir $\rho(\vec{r}, t) = \rho_0 + \delta\rho(\vec{r}, t)$, $v_i(\vec{r}, t) = \delta v_i(\vec{r}, t)$, $n_i(\vec{r}, t) = n_i^0 + \delta n_i(\vec{r}, t)$, $p(\vec{r}, t) = p_0 + \delta p(\vec{r}, t)$, $T(\vec{r}, t) = T_0 + \delta T(\vec{r}, t)$ y $\sigma(\vec{r}, t) = \sigma_0 + \delta\sigma(\vec{r}, t)$. De esta manera, al sustituir estas variables en las ecuaciones de conservación y de balance (1.161)-(1.164), y reescribirlas sólo hasta primer orden en términos de las desviaciones — que pueden ser aleatorias — se obtiene el sistema de ecuaciones nemáticas lineales

$$\frac{\partial}{\partial t} \delta\rho + \rho_0 \frac{\partial}{\partial x_i} \delta v_i = 0, \quad (2.27)$$

³En lo sucesivo, cualquier cantidad termodinámica que se halle referida al estado de equilibrio termodinámico, se denotará con un subíndice o superíndice 0.

$$\rho_0 \frac{\partial}{\partial t} \delta v_i - \frac{\partial}{\partial x_j} \delta \sigma_{ij} = \delta \rho f_i, \quad (2.28)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \delta \sigma + \sigma_0 \frac{\partial}{\partial x_k} \delta v_k + \frac{1}{T_0} \frac{\partial}{\partial x_l} \delta q_l = \frac{2\delta R}{T_0}, \quad (2.29)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \delta n_i + \delta Y_i = 0. \quad (2.30)$$

Estas ecuaciones describen la evolución de las desviaciones de las variables nemáticas respecto al estado de equilibrio termodinámico cuando éstas son pequeñas.

En el conjunto (2.27)-(2.30) las desviaciones del tensor de esfuerzos $\delta \sigma_{ij}$, el flujo de calor δq_l y la cuasi-corriente δY_i están dadas, respectivamente, por

$$\delta \sigma_{ij} = -\delta p \delta_{ij} + \frac{1}{2} \lambda_{kji}^0 \delta h_k + \nu_{ijkl}^0 \frac{\partial}{\partial x_l} \delta v_k \quad (2.31)$$

$$\delta q_l \equiv -\kappa_{lj}^0 \frac{\partial}{\partial x_j} \delta T, \quad (2.32)$$

$$\delta Y_i = -\frac{1}{2} \lambda_{ijk}^0 \frac{\partial}{\partial x_j} \delta v_k + \frac{1}{\gamma_1} \delta_{ik}^{\perp 0} \delta h_k, \quad (2.33)$$

en donde $\delta_{ij}^{\perp 0} \equiv \delta_{ij} - n_i^0 n_j^0$. La desviación $\delta \sigma_{ij}$ indicada por (2.31), se obtuvo de (1.166) insertando en ésta (1.175), y δY_i , a partir de (1.168) considerando (1.176). Asimismo, en (2.31) y (2.33) las desviaciones del campo molecular δh_k , tomando en cuenta (1.169), se escriben como

$$\delta h_k \equiv -K_{kjm}^0 \frac{\partial^2}{\partial x_j \partial x_l} \delta n_m; \quad (2.34)$$

mientras que las cantidades ν_{ijkl}^0 , κ_{ij}^0 , K_{ljk}^0 y λ_{kji}^0 , de acuerdo con (1.170), (1.171), (1.172) y (1.174), están dadas, respectivamente, como

$$\begin{aligned} \nu_{ijkl}^0 &\equiv \nu_2 (\delta_{jl} \delta_{ik} + \delta_{il} \delta_{jk}) + 2(\nu_1 + \nu_2 - 2\nu_3) n_i^0 n_j^0 n_k^0 n_l^0 + (\nu_3 - \nu_2) (n_j^0 n_l^0 \delta_{ik} + n_j^0 n_k^0 \delta_{il} \\ &+ n_i^0 n_k^0 \delta_{jl} + n_i^0 n_l^0 \delta_{jk}) + (\nu_4 - \nu_2) \delta_{ij} \delta_{kl} + (\nu_5 - \nu_4 + \nu_2) (\delta_{ij} n_k^0 n_l^0 + \delta_{kl} n_i^0 n_j^0), \end{aligned} \quad (2.35)$$

$$\kappa_{ij}^0 \equiv \kappa_{\perp} \delta_{ij} + \kappa_a n_i^0 n_j^0, \quad (2.36)$$

$$\begin{aligned} K_{ljk}^0 &\equiv K_1 (\delta_{lj} \delta_{km} - n_l^0 n_j^0 \delta_{km} - \delta_{lj} n_k^0 n_m^0 + n_l^0 n_j^0 n_k^0 n_m^0) \\ &+ K_2 \epsilon_{plj} \epsilon_{qkm} n_p^0 n_q^0 + K_3 (n_j^0 n_m^0 \delta_{lk} - n_j^0 n_m^0 n_l^0 n_k^0), \end{aligned} \quad (2.37)$$

$$\lambda_{kji}^0 \equiv (\lambda - 1) (\delta_{kj} n_i^0 - n_k^0 n_j^0 n_i^0) + (\lambda + 1) (\delta_{ki} n_j^0 - n_k^0 n_i^0 n_j^0). \quad (2.38)$$

Se considerará que los valores de los coeficientes viscosos ν_1 , ν_2 , ν_3 , ν_4 y ν_5 , las conductividades térmicas κ_{\parallel} y κ_{\perp} , las constantes elásticas de Frank K_1 , K_2 y K_3 , la viscosidad rotacional γ_1 , así como el parámetro λ , son los que presenta el sistema en el estado de equilibrio termodinámico.

La desviación de la función de disipación $2\delta R$ indicada en (2.29), considerando (1.165) y (2.34), se escribe en la forma

$$\begin{aligned} 2\delta R &= \nu_{ijkl}^0 \left(\frac{\partial}{\partial x_j} \delta v_i \right) \left(\frac{\partial}{\partial x_l} \delta v_k \right) + \frac{1}{T_0} \kappa_{ij}^0 \left(\frac{\partial}{\partial x_i} \delta T \right) \left(\frac{\partial}{\partial x_j} \delta T \right) \\ &+ \frac{1}{\gamma_1} \delta_{ij}^{\perp 0} \left(K_{ijkl}^0 \frac{\partial^2}{\partial x_j \partial x_l} \delta n_k \right) \left(K_{jmkl}^0 \frac{\partial^2}{\partial x_m \partial x_l} \delta n_k \right). \end{aligned} \quad (2.39)$$

Respecto a esta expresión, es importante señalar que es de segundo orden en las desviaciones δv_i , δT y δn_i , por lo que con la finalidad de mantener la consistencia con la descripción hasta primer orden de las desviaciones de las variables nemáticas impuesta en la deducción de las ecuaciones (2.27) a (2.30), en esta última se considerará $2\delta R = 0$. No obstante, debido a que será utilizada más adelante, por esa razón en (2.39) se ha indicado la forma explícita de $2\delta R$. Finalmente, suponderemos que no hay fuerzas externas que actúan sobre el fluido nemático, de modo que en (2.28) se hará $f_i = 0$.

De las cuatro cantidades termodinámicas escalares $\delta\rho$, δT , δp y $\delta\sigma$, que en general pueden ser estocásticas, e indicadas en el sistema de ecuaciones (2.27)-(2.30), sólo las parejas $\delta\rho$, δT y δp , $\delta\sigma$ en el estado de equilibrio son estadísticamente independientes, es decir, el promedio de sus productos es nulo [12]: $\langle\delta\rho\delta T\rangle = \langle\delta p\delta\sigma\rangle = 0$. La independencia estadística de cualquiera de los dos conjuntos mencionados, al utilizarlos como variables termodinámicas independientes en las ecuaciones de conservación y de balance nemáticas, simplifica considerablemente el análisis. En lo que resta del capítulo usaremos el sistema (2.27)-(2.30) escritos en términos de las desviaciones escalares $\delta\rho$ y δT , en vez de δp y $\delta\sigma$, dado que se pretende hacer un paralelismo con el procedimiento empleado por Fox y Uhlenbeck. En algunos casos puede resultar mucho más conveniente elegir a un conjunto sobre el otro; esto dependerá principalmente del proceso que se quiera describir, tal como se ilustrará en los capítulos siguientes.

De esta manera, al sustituir los flujos (2.31)-(2.33) en el sistema de ecuaciones (2.27)-(2.30), y al reescribir éste únicamente en términos de las desviaciones escalares $\delta\rho$ y δT , se encuentra

$$\frac{\partial}{\partial t}\delta\rho + \rho_0\frac{\partial}{\partial x_l}\delta v_l = 0, \quad (2.40)$$

$$\rho_0\frac{\partial}{\partial t}\delta v_i + A\frac{\partial}{\partial x_i}\delta\rho + B\frac{\partial}{\partial x_i}\delta T + \frac{1}{2}\lambda_{kji}^0 K_{ksmr}^0 \frac{\partial^3}{\partial x_j\partial x_s\partial x_r}\delta n_m - \nu_{ijkl}^0 \frac{\partial^2}{\partial x_j\partial x_l}\delta v_k = 0, \quad (2.41)$$

$$\rho_0 C\frac{\partial}{\partial t}\delta T + T_0 B\frac{\partial}{\partial x_l}\delta v_l - \kappa_{sj}^0 \frac{\partial^2}{\partial x_s\partial x_j}\delta T = 0, \quad (2.42)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}\delta n_i - \frac{1}{2}\lambda_{ijk}^0 \frac{\partial}{\partial x_j}\delta v_k - \frac{1}{\gamma_1}\delta_{ik}^{\perp 0} K_{kjm}^0 \frac{\partial^2}{\partial x_j\partial x_l}\delta n_m = 0, \quad (2.43)$$

en donde se han definido los coeficientes

$$A \equiv \left(\frac{\partial p}{\partial\rho}\right)_T = c_T^2, \quad (2.44)$$

$$B \equiv \left(\frac{\partial p}{\partial T}\right)_\rho = \frac{\beta}{\kappa_T} = \rho_0\beta c_T^2, \quad (2.45)$$

$$C \equiv \frac{T}{\rho} \left(\frac{\partial\sigma}{\partial T}\right)_\rho = c_v, \quad (2.46)$$

siendo c_T la velocidad isotérmica del sonido, c_v el calor específico (capacidad calorífica por unidad de masa) a volumen constante, $\beta \equiv -(1/\rho)(\partial\rho/\partial T)_p$ el coeficiente de expansividad térmica y $\kappa_T = (1/\rho)(\partial\rho/\partial p)_T = (\rho c_T^2)^{-1}$ es el coeficiente de compresibilidad isotérmica. Debido a la hipótesis de equilibrio local, ha sido

posible escribir a las ecuaciones (2.41) y (2.42) en términos de las cantidades termodinámicas $\delta\rho$ y δT a través de las ecuaciones de estado

$$\delta p = \left(\frac{\partial p}{\partial \rho} \right)_T \delta \rho + \left(\frac{\partial p}{\partial T} \right)_\rho \delta T, \quad (2.47)$$

$$\delta \sigma = \left(\frac{\partial \sigma}{\partial \rho} \right)_T \delta \rho + \left(\frac{\partial \sigma}{\partial T} \right)_\rho \delta T, \quad (2.48)$$

en donde $(\partial\sigma/\partial\rho)_T = (\sigma - \beta/\kappa_T)/\rho$. Asimismo, en la deducción de (2.42), también se ha empleado la ecuación de conservación de masa (2.40). El sistema de ecuaciones nematodinámicas lineales (2.40)-(2.43), está completamente cerrado, y será el punto de partida para los desarrollos teóricos subsecuentes.

Con la finalidad de aplicar el formalismo desarrollado en la sección anterior, es conveniente reescribir al conjunto de ecuaciones (2.40) a (2.43), en términos de las siguientes variables con la misma dimensión

$$a_1 = \left(\frac{1}{\rho_0} \right)^{1/2} \delta \rho, \quad (2.49)$$

$$a_\alpha = \left(\frac{\rho_0}{A} \right)^{1/2} \delta v_\alpha, \quad (2.50)$$

$$a_5 = \left(\frac{\rho_0 C}{T_0 A} \right)^{1/2} \delta T, \quad (2.51)$$

$$a_\mu = (\rho_0)^{1/2} \delta n_\mu, \quad (2.52)$$

en las que con $\alpha = 2, 3, 4$, se denotan a las componentes de las desviaciones de la velocidad mientras que con $\mu = 6, 7, 8$ a las del vector director; asimismo, obsérvese que $[a_i] = \rho^{1/2} = M^{1/2} L^{-3/2}$. De esta manera, las ecuaciones (2.40)-(2.43) se reescriben como

$$\frac{\partial}{\partial t} a_1 + A^{1/2} \frac{\partial}{\partial x_\alpha} a_\alpha = 0, \quad (2.53)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} a_\alpha + A^{1/2} \frac{\partial}{\partial x_\alpha} a_1 - \frac{1}{\rho_0} \nu_{\alpha j \beta l}^0 \frac{\partial^2}{\partial x_j \partial x_l} a_\beta + \frac{B}{\rho_0} \left(\frac{T_0}{C} \right)^{1/2} \frac{\partial}{\partial x_\alpha} a_5 \\ + \frac{1}{2\rho_0 A^{1/2}} \lambda_{kj\alpha}^0 K_{ks\mu r}^0 \frac{\partial^3}{\partial x_j \partial x_s \partial x_r} a_\mu = 0, \end{aligned} \quad (2.54)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} a_5 + \frac{B}{\rho_0} \left(\frac{T_0}{C} \right)^{1/2} \frac{\partial}{\partial x_\alpha} a_\alpha - \frac{1}{\rho_0 C} \kappa_{ij}^0 \frac{\partial^2}{\partial x_i \partial x_j} a_5 = 0, \quad (2.55)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} a_\mu - \frac{1}{2} A^{1/2} \lambda_{\mu j \alpha}^0 \frac{\partial}{\partial x_j} a_\alpha - \frac{1}{\gamma_1} \delta_{\mu k}^0 \perp K_{kj\nu l}^0 \frac{\partial^2}{\partial x_j \partial x_l} a_\nu = 0, \quad (2.56)$$

en donde los índices latinos i, j, k, l, m toman los valores $\{1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8\}$, en tanto que de los índices griegos α, β (componentes de las desviaciones de la velocidad) se asocian sólo con $\{2, 3, 4\}$ y μ, ν (componentes de las desviaciones del director) con $\{6, 7, 8\}$.

Al considerar el vector columna $\vec{a} = (a_1, a_\alpha, a_5, a_\mu)^\dagger$ cuyas componentes son las cantidades (2.49)-(2.52), resulta posible escribir el sistema de ecuaciones (2.53)-(2.56) en la forma

$$\frac{\partial}{\partial t} a_i(\vec{r}, t) = - \int G_{ij}(\vec{r}, \vec{r}') a_j(\vec{r}', t) d^3 r', \quad (2.57)$$

que es la forma integral de (2.15). Por convención, en (2.57) los índices discretos repetidos se suman y los argumentos r, r' se consideran como índices continuos (dando su suma lugar a la integral mostrada).

Entonces

$$G(\vec{r}, \vec{r}') \equiv \begin{pmatrix} 0 & G_{1\alpha} & 0 & 0 \\ G_{\alpha 1} & G_{\alpha\beta} & G_{\alpha 5} & G_{\alpha\mu} \\ 0 & G_{5\alpha} & G_{55} & 0 \\ 0 & G_{\mu\alpha} & 0 & G_{\mu\nu} \end{pmatrix}, \quad (2.58)$$

es la matriz de coeficientes fenomenológicos, cuyos elementos son

$$G_{1\alpha} \equiv G_{\alpha 1} = A^{1/2} \frac{\partial}{\partial x_\alpha} \delta(\vec{r} - \vec{r}'), \quad (2.59)$$

$$G_{\alpha\beta} \equiv \frac{1}{\rho_0} \nu_{\alpha j \beta l}^0 \frac{\partial^2}{\partial x_j \partial x'_l} \delta(\vec{r} - \vec{r}'), \quad (2.60)$$

$$G_{\alpha 5} = G_{5\alpha} \equiv \frac{B}{\rho_0} \left(\frac{T_0}{C} \right)^{1/2} \frac{\partial}{\partial x_\alpha} \delta(\vec{r} - \vec{r}'), \quad (2.61)$$

$$G_{55} \equiv \frac{1}{\rho_0 C} \kappa_{ij}^0 \frac{\partial^2}{\partial x_i \partial x'_j} \delta(\vec{r} - \vec{r}'), \quad (2.62)$$

$$G_{\alpha\mu} \equiv -\frac{1}{2\rho_0 A^{1/2}} \lambda_{kj\alpha}^0 K_{ks\mu r}^0 \frac{\partial^3}{\partial x_j \partial x_s \partial x'_r} \delta(\vec{r} - \vec{r}'), \quad (2.63)$$

$$G_{\mu\alpha} \equiv -\frac{1}{2} A^{1/2} \lambda_{ij\alpha}^0 \frac{\partial}{\partial x_j} \delta(\vec{r} - \vec{r}'), \quad (2.64)$$

$$G_{\mu\nu} \equiv \frac{1}{\gamma_1} \delta_{ik}^0 \perp K_{kj\nu l}^0 \frac{\partial^2}{\partial x_j \partial x'_l} \delta(\vec{r} - \vec{r}'), \quad (2.65)$$

en donde hemos considerado que para coordenadas relativas $\partial/\partial x_j = -\partial/\partial x'_j$. A su vez, la matriz de coeficientes fenomenológicos $G_{ij}(\vec{r}, \vec{r}')$ puede expresarse como

$$G_{ij}(\vec{r}, \vec{r}') = S_{ij}(\vec{r}, \vec{r}') + A_{ij}(\vec{r}, \vec{r}'), \quad (2.66)$$

siendo la suma de la matriz simétrica

$$S(\vec{r}, \vec{r}') \equiv \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & S_{\alpha\beta} & 0 & S_{\alpha\mu} \\ 0 & 0 & S_{55} & 0 \\ 0 & S_{\mu\alpha} & 0 & S_{\mu\nu} \end{pmatrix}, \quad (2.67)$$

de elementos

$$S_{\alpha\beta} \equiv \frac{1}{\rho_0} \nu_{\alpha j \beta l}^0 \frac{\partial^2}{\partial x_j \partial x'_l} \delta(\vec{r} - \vec{r}'), \quad (2.68)$$

$$S_{55} \equiv \frac{1}{\rho_0 C} \kappa_{ij}^0 \frac{\partial^2}{\partial x_i \partial x'_j} \delta(\vec{r} - \vec{r}'), \quad (2.69)$$

$$S_{\alpha\mu} \equiv -\frac{1}{2} \left(\frac{1}{2\rho_0 A^{1/2}} \lambda_{kj\alpha}^0 K_{ks\mu r}^0 \frac{\partial^3}{\partial x_j \partial x_s \partial x'_r} - \frac{1}{2} A^{1/2} \lambda_{\mu j \alpha}^0 \frac{\partial}{\partial x_j} \right) \delta(\vec{r} - \vec{r}'), \quad (2.70)$$

$$S_{\mu\alpha} \equiv -\frac{1}{2} \left(\frac{1}{2} A^{1/2} \lambda_{\mu j \alpha}^0 \frac{\partial}{\partial x_j} - \frac{1}{2\rho_0 A^{1/2}} \lambda_{kj\alpha}^0 K_{ks\mu r}^0 \frac{\partial^3}{\partial x_j \partial x_s \partial x'_r} \right) \delta(\vec{r} - \vec{r}'), \quad (2.71)$$

$$S_{\mu\nu} \equiv \frac{1}{\gamma_1} \delta_{\mu k}^0 \perp K_{kj\nu l}^0 \frac{\partial^2}{\partial x_j \partial x'_l} \delta(\vec{r} - \vec{r}'); \quad (2.72)$$

con la matriz antisimétrica

$$A(\vec{r}, \vec{r}') \equiv \begin{pmatrix} 0 & A_{1\alpha} & 0 & 0 \\ A_{\alpha 1} & 0 & A_{\alpha 5} & A_{\alpha\mu} \\ 0 & A_{5\alpha} & 0 & 0 \\ 0 & A_{\mu\alpha} & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad (2.73)$$

con elementos

$$A_{1\alpha} \equiv A_{\alpha 1} = A^{1/2} \frac{\partial}{\partial x_\alpha} \delta(\vec{r} - \vec{r}'), \quad (2.74)$$

$$A_{\alpha 5} = A_{5\alpha} \equiv \frac{B}{\rho_0} \left(\frac{T_0}{C} \right)^{1/2} \frac{\partial}{\partial x_\alpha} \delta(\vec{r} - \vec{r}'), \quad (2.75)$$

$$A_{\alpha\mu} \equiv -\frac{1}{2} \left(\frac{1}{2\rho_0 A^{1/2}} \lambda_{kj\alpha}^0 K_{ks\mu r}^0 \frac{\partial^3}{\partial x_j \partial x_s \partial x'_r} + \frac{1}{2} A^{1/2} \lambda_{\mu j \alpha}^0 \frac{\partial}{\partial x_j} \right) \delta(\vec{r} - \vec{r}'), \quad (2.76)$$

$$A_{\mu\alpha} \equiv -\frac{1}{2} \left(\frac{1}{2} A^{1/2} \lambda_{\mu j \alpha}^0 \frac{\partial}{\partial x_j} + \frac{1}{2\rho_0 A^{1/2}} \lambda_{kj\alpha}^0 K_{ks\mu r}^0 \frac{\partial^3}{\partial x_j \partial x_s \partial x'_r} \right) \delta(\vec{r} - \vec{r}'). \quad (2.77)$$

De esta manera, podemos reescribir a (2.57) en la forma

$$\frac{\partial}{\partial t} a_i(\vec{r}, t) = - \int S_{ij}(\vec{r}, \vec{r}') a_j(\vec{r}', t) d^3 r' - \int A_{ij}(\vec{r}, \vec{r}') a_j(\vec{r}', t) d^3 r'. \quad (2.78)$$

Es posible verificar que S_{ij} y A_{ij} ante el intercambio de todos los tipos de índices, presentan respectivamente las siguientes propiedades de simetría y de antisimetría [6], [53], [111]

$$S_{ij}(\vec{r}, \vec{r}') = S_{ji}(\vec{r}', \vec{r}), \quad (2.79)$$

$$A_{ij}(\vec{r}, \vec{r}') = -A_{ji}(\vec{r}', \vec{r}). \quad (2.80)$$

Si a (2.57) se le añade en forma aditiva el vector de fuerza estocástica F_i , se tiene la ecuación de Langevin generalizada

$$\frac{\partial}{\partial t} a_i(\vec{r}, t) = - \int G_{ij}(\vec{r}, \vec{r}') a_j(\vec{r}', t) d^3 r' + F_i(\vec{r}, t), \quad (2.81)$$

la cual, al considerar (2.66) da lugar a la forma integral de la ecuación de Langevin (2.16)

$$\frac{\partial}{\partial t} a_i(\vec{r}, t) = - \int S_{ij}(\vec{r}, \vec{r}') a_j(\vec{r}', t) d^3 r' - \int A_{ij}(\vec{r}, \vec{r}') a_j(\vec{r}', t) d^3 r' + F_i(\vec{r}, t), \quad (2.82)$$

en donde el término estocástico F_i , de acuerdo con (2.17) y (2.18), es de promedio cero $\langle F_i(\vec{r}, t) \rangle = 0$ y está correlacionado en la forma

$$\langle F_i(\vec{r}, t), F_j(\vec{r}', t') \rangle = 2Q_{ij}(\vec{r}, \vec{r}') \delta(t - t'), \quad (2.83)$$

en donde Q_{ij} es una matriz simétrica definida positiva para las fuerzas estocásticas, que se precisará más adelante, y $\langle \dots \rangle$ denota un promedio estocástico sobre las realizaciones de dichas fuerzas. Es importante

señalar que debido a la incorporación de la fuerza estocástica F_i , el conjunto de ecuaciones (2.81) se convierte en un sistema de ecuaciones estocástico (fluctuante), en el cual las variables a_i adquieren un carácter estocástico: dejan de ser desviaciones para interpretarse ahora como fluctuaciones de las variables nemáticas. Dado que (2.81) es lineal, es de esperarse que la naturaleza estocástica de las variables a_i sea la misma que la de las fuerzas F_i .

El sistema de ecuaciones (2.81) posee la misma estructura que la ecuación típica de Langevin que describe el movimiento browniano de partículas esféricas ligeras inmersas en un fluido [53]. Sin embargo, la analogía sólo queda hasta allí, pues (2.81) describe una situación física mucho más compleja, que corresponde a la dinámica de las fluctuaciones de un fluido de moléculas anisótropas que tienden a orientarse en la dirección preferente n_i . De esta manera, los términos contenidos en la matriz G_{ij} son de fricción o disipativos y tal como puede observarse en (2.58)-(2.65), recaban información de los parámetros anisótropos $\delta_{\mu k}^{0\perp}$, $\lambda_{kj\alpha}^0$ de la dirección preferente n_i de las moléculas, así como de los parámetros materiales $\nu_{\alpha j\beta l}^0$, κ_{ij}^0 , $K_{ks\mu r}^0$ del fluido en el que éstas están contenidas. Por otra parte, los términos estocásticos F_i son una representación fenomenológica de los efectos que producen la enorme cantidad de colisiones microscópicas que ocurren entre las moléculas anisótropas del nemático y las moléculas del fluido en el que se encuentran. La presencia de la delta de Dirac $\delta(t-t')$ en el segundo momento (2.83), indica que las escalas temporales de las correlaciones entre las fluctuaciones son mucho menores que sus tiempos de relajación.

Ahora bien, en esta descripción la ley de producción de entropía (1.133) debe escribirse en la forma

$$\frac{d}{dt}S(t) = \int_V \frac{2\delta R}{T_0} dV, \quad (2.84)$$

en donde $2\delta R$ es la función de disipación dada por (2.39). Al sustituir (2.39) en (2.84), se encuentra que la ley de producción de entropía para las fluctuaciones de las variables de estado de un cristal líquido nemático termótropo está dada por

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}S(t) = \int \left[\frac{1}{(T_0)^2} \kappa_{ij}^0 \left(\frac{\partial}{\partial x_i} \delta T \right) \left(\frac{\partial}{\partial x_j} \delta T \right) + \frac{1}{T_0} \nu_{ijkl}^0 \left(\frac{\partial}{\partial x_j} \delta v_i \right) \left(\frac{\partial}{\partial x_l} \delta v_k \right) \right. \\ \left. + \frac{1}{\gamma_1 T_0} \delta_{ij}^{0\perp} \left(K_{ijkl}^0 \frac{\partial^2}{\partial x_j \partial x_l} \delta n_k \right) \left(K_{jmk l}^0 \frac{\partial^2}{\partial x_m \partial x_l} \delta n_k \right) \right] dV, \end{aligned} \quad (2.85)$$

la cual es siempre una cantidad positiva. Al escribir la producción de entropía anterior en términos de las variables (2.49)-(2.52), ésta se transforma en

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}S(t) = \frac{1}{2} k_B \left(\frac{2A}{k_B T_0} \right) \int \left[a_5 \left(\frac{1}{\rho_0 C} \kappa_{ij}^0 \frac{\partial}{\partial x_i} \frac{\partial}{\partial x'_j} \right) a_5 + a_\alpha \left(\frac{1}{\rho_0} \nu_{\alpha j\beta l}^0 \frac{\partial}{\partial x_j} \frac{\partial}{\partial x'_l} \right) a_\beta \right. \\ \left. + a_\mu \left(\frac{1}{\gamma_1 A \rho_0} \delta_{ij}^{0\perp} K_{ij\mu l}^0 \frac{\partial^2}{\partial x_j \partial x'_l} K_{j\mu\nu l}^0 \frac{\partial^2}{\partial x_m \partial x'_l} \right) a_\nu \right] dV. \end{aligned} \quad (2.86)$$

Por otra parte, la expresión para la entropía (2.1), puede ser escrita en la forma integral

$$S(t) = S_0 - \frac{1}{2} k_B \int \int a_i(\vec{r}, t) E_{ij}(\vec{r}, \vec{r}') a_j(\vec{r}', t) d^3 r d^3 r', \quad (2.87)$$

en donde S_0 , como antes, es una constante y E_{ij} una matriz simétrica definida positiva cuyos elementos no dependen de t . Al derivar respecto del tiempo a (2.87) y utilizar (2.78), se obtiene la producción de entropía

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}S(t) &= \frac{1}{2}k_B \int \int \int a_i(\vec{r}, t) [E_{ik}(\vec{r}, \vec{r}'') S_{kj}(\vec{r}'', \vec{r}') + S_{ik}(\vec{r}, \vec{r}'') E_{kj}(\vec{r}'', \vec{r}')] \\ &\quad + E_{ik}(\vec{r}, \vec{r}'') A_{kj}(\vec{r}'', \vec{r}') - A_{ik}(\vec{r}, \vec{r}'') E_{kj}(\vec{r}'', \vec{r}')] a_j(\vec{r}', t) d^3r d^3r' d^3r'', \end{aligned} \quad (2.88)$$

en cuya deducción también se han tomado en cuenta las propiedades de simetría y de antisimetría (2.79) y (2.80). Ahora bien, si se emplean las matrices S_{ij} y A_{ij} dadas respectivamente por (2.67) y (2.73), y se considera a la matriz simétrica

$$E(\vec{r}, \vec{r}') = \begin{pmatrix} E_{11} & E_{1\beta} & E_{15} & E_{1\nu} \\ E_{\alpha 1} & E_{\alpha\beta} & E_{\alpha 5} & E_{\alpha\nu} \\ E_{51} & E_{5\beta} & E_{55} & E_{5\nu} \\ E_{\mu 1} & E_{\mu\beta} & E_{\mu 5} & E_{\mu\nu} \end{pmatrix}, \quad (2.89)$$

entonces (2.88) puede reescribirse en la forma

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}S(t) &= \frac{1}{2}k_B \int \int \int [a_\alpha (S_{\alpha\beta} E_{\alpha 1} + S_{\alpha\mu} E_{\mu 1}) a_1 + a_\mu (S_{\mu\alpha} E_{1\alpha} + S_{\mu\nu} E_{\mu 1}) a_1 + a_1 (S_{\alpha\beta} E_{\alpha 1} + S_{\alpha\mu} E_{\mu 1}) a_\beta \\ &\quad + a_5 (S_{55} E_{51}) a_1 + a_\alpha (E_{\alpha\beta} S_{\alpha\beta} + S_{\alpha\beta} E_{\alpha\beta} + E_{\alpha\nu} S_{\mu\beta} + S_{\alpha\mu} E_{\mu\beta}) a_\beta + a_5 (E_{55} S_{55} + S_{55} E_{55}) a_5 \\ &\quad + a_1 (S_{55} E_{51}) a_5 + a_\alpha (E_{5\beta} S_{\alpha\beta} + S_{55} E_{5\beta} + E_{5\nu} S_{\mu\alpha}) a_5 + a_5 (E_{\mu 5} S_{55} + S_{5\alpha} E_{\alpha 5} + S_{\mu\nu} E_{\mu 5}) a_\nu \\ &\quad + a_5 (E_{5\beta} S_{\alpha\beta} + S_{55} E_{5\beta} + E_{5\nu} S_{\mu\alpha}) a_\beta + a_\mu (E_{\mu\beta} S_{\alpha\beta} + E_{\mu\nu} S_{\mu\alpha} + S_{\mu\alpha} E_{\nu\beta} + S_{\mu\nu} E_{\mu\beta}) a_\beta \\ &\quad + a_\mu (E_{\mu\beta} S_{\alpha\mu} + E_{\mu\nu} S_{\mu\nu} + S_{\mu\alpha} E_{\alpha\nu} + S_{\mu\nu} E_{\mu\nu}) a_\nu] d^3r d^3r' d^3r''. \end{aligned} \quad (2.90)$$

Al comparar (2.90) con (2.86), resulta posible hacer las identificaciones

$$S_{\alpha\beta} E_{\alpha 1} + S_{\alpha\mu} E_{\mu 1} = 0, \quad (2.91)$$

$$S_{\mu\alpha} E_{1\alpha} + S_{\mu\nu} E_{\mu 1} = 0, \quad (2.92a)$$

$$S_{55} E_{51} = 0, \quad (2.93)$$

$$E_{5\beta} S_{\alpha\beta} + S_{55} E_{5\beta} + E_{5\nu} S_{\mu\alpha} = 0, \quad (2.94)$$

$$E_{\mu\beta} S_{\alpha\beta} + E_{\mu\nu} S_{\mu\alpha} + S_{\mu\alpha} E_{\nu\beta} + S_{\mu\nu} E_{\mu\beta} = 0, \quad (2.95)$$

$$E_{\mu 5} S_{55} + S_{5\alpha} E_{\alpha 5} + S_{\mu\nu} E_{\mu 5} = 0, \quad (2.96)$$

$$E_{55} S_{55} + S_{55} E_{55} = \frac{2A}{k_B T_0} \left(\frac{1}{\rho_0 C} \kappa_{ij}^0 \frac{\partial}{\partial x_i} \frac{\partial}{\partial x_j'} \right), \quad (2.97)$$

$$E_{\alpha\beta} S_{\alpha\beta} + S_{\alpha\beta} E_{\alpha\beta} + E_{\alpha\nu} S_{\mu\beta} + S_{\alpha\mu} E_{\mu\beta} = \frac{2A}{k_B T_0} \left(\frac{1}{\rho_0} \nu_{\alpha j \beta l}^0 \frac{\partial}{\partial x_j} \frac{\partial}{\partial x_l'} \right), \quad (2.98)$$

$$E_{\mu\beta} S_{\alpha\mu} + E_{\mu\nu} S_{\mu\nu} + S_{\mu\alpha} E_{\alpha\nu} + S_{\mu\nu} E_{\mu\nu} = \frac{2A}{k_B T_0} \left(\frac{1}{\gamma_1 A \rho_0} \delta_{ij}^0 \perp K_{ij\mu l}^0 \frac{\partial^2}{\partial x_j \partial x_l'} K_{j\mu\nu l}^0 \frac{\partial^2}{\partial x_m \partial x_l'} \right). \quad (2.99)$$

Para que las expresiones (2.91)-(2.96) sean nulas, debe ocurrir que $E_{\alpha 1} = E_{51} = E_{5\beta} = E_{\mu 1} = E_{\mu\beta} = E_{\mu 5} = 0$, dado que $S_{\alpha\beta}$, S_{55} , $S_{\mu\alpha}$ ni $S_{\mu\nu}$ son cero, tal como puede verse en las entradas de la matriz simétrica (2.67). Por consiguiente, la matriz simétrica (2.89) es de la forma

$$E(\vec{r}, \vec{r}') = \begin{pmatrix} E_{11} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & E_{\alpha\beta} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & E_{55} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & E_{\mu\nu} \end{pmatrix}. \quad (2.100)$$

La forma explícita de (2.100) es

$$E(\vec{r}, \vec{r}') = \frac{A}{k_B T_0} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \delta_{\alpha\beta} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{1}{\rho_0 A} K_{kl\mu\nu}^0 \frac{\partial^2}{\partial x_k \partial x_l'} \end{pmatrix} \delta(\vec{r} - \vec{r}'), \quad (2.101)$$

en donde $\alpha, \beta = 2, 3, 4$ y $\mu, \nu = 6, 7, 8$.

De acuerdo con la teoría de procesos estocásticos desarrollada en la sección anterior, el teorema de fluctuación-disipación (2.20) puede escribirse en la forma integral

$$2Q_{ij}(\vec{r}, \vec{r}') = \int [G_{ik}(\vec{r}, \vec{r}'') E_{kj}^{-1}(\vec{r}'', \vec{r}') + E_{ik}^{-1}(\vec{r}, \vec{r}'') G_{kj}^\dagger(\vec{r}'', \vec{r}')] d^3 r'', \quad (2.102)$$

en la cual G_{ik} es la matriz de coeficientes fenomenológicos (2.58) y $E_{ij}^{-1}(\vec{r}, \vec{r}')$ es la inversa de (2.101) dada por

$$E^{-1}(\vec{r}, \vec{r}') = \frac{k_B T_0}{A} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \delta_{\alpha\beta} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \rho_0 A \left(K_{kl\mu\nu}^0 \frac{\partial^2}{\partial x_k \partial x_l'} \right)^{-1} \end{pmatrix} \delta(\vec{r} - \vec{r}'), \quad (2.103)$$

en donde, como antes, $\alpha, \beta = 2, 3, 4$ y $\mu, \nu = 6, 7, 8$. Por consiguiente, al utilizar (2.103) y (2.58) en (2.102), puede demostrarse que el tensor Q_{ij} finalmente adquiere la forma

$$Q(\vec{r}, \vec{r}') = \frac{k_B T_0}{A} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{\rho_0} \nu_{\alpha j \beta l}^0 \frac{\partial^2}{\partial x_j \partial x_l'} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{\rho_0 C} \kappa_{ij}^0 \frac{\partial^2}{\partial x_i \partial x_j'} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \rho_0 A \frac{1}{\gamma_1} \delta_{\mu\nu}^{0\perp} \end{pmatrix} \delta(\vec{r} - \vec{r}'). \quad (2.104)$$

No obstante que desde un principio se supuso que E_{ij} debería ser simétrica, tal como indicó en (2.87), posteriormente se encontró como consecuencia de tomar en cuenta la ley de producción de entropía del sistema, que E_{ij} además debe ser diagonal, tal como puede verse en (2.100). Por consiguiente, al igual que en el caso del fluido simple, resulta innecesario suponer que E_{ij} además de ser simétrica, también deba ser diagonal [112].

2.3.2. Teoremas de fluctuación-disipación de un nemático

Puede verse de la expresión (2.104) que $Q_{11} = 0$, lo cual implica que a la ecuación de continuidad (2.53) no puede asociársele una fuerza fluctuante, es decir $F_1 = 0$. Además, también de (2.104) puede observarse en las entradas $Q_{\alpha\beta}$ y Q_{55} la presencia de derivadas parciales, excepto en $Q_{\mu\nu}$. Estas derivadas parciales pueden eliminarse, si en vez de trabajar con las fuerzas estocásticas F_i , se introducen las nuevas cantidades aleatorias $\Sigma_{\alpha\beta}$, π_l y Υ_μ (con las mismas propiedades estocásticas que las F_i), en la forma⁴

$$F_\alpha(\vec{r}, t) \equiv \left(\frac{1}{\rho_0 A}\right)^{1/2} \frac{\partial}{\partial x_\beta} \Sigma_{\alpha\beta}(\vec{r}, t), \quad (2.105)$$

$$F_5(\vec{r}, t) \equiv \left(\frac{1}{\rho_0 T_0 AC}\right)^{1/2} \frac{\partial}{\partial x_l} \pi_l(\vec{r}, t), \quad (2.106)$$

$$F_\mu(\vec{r}, t) \equiv (\rho_0)^{1/2} \Upsilon_\mu(\vec{r}, t). \quad (2.107)$$

De esta manera, al tomar en consideración las definiciones (2.105)-(2.107) y la matriz (2.104), de acuerdo con la relación (2.83), se obtienen los siguientes tres teoremas de fluctuación-disipación.

El primero se encuentra al sustituir $Q_{\alpha\beta}$ de (2.104) en (2.83), para obtener

$$\begin{aligned} \langle F_\alpha(\vec{r}, t) F_\beta(\vec{r}', t') \rangle &= 2Q_{\alpha\beta}(\vec{r}, \vec{r}') \delta(t - t') \\ &= \frac{2k_B T_0}{A} \frac{1}{\rho_0} \nu_{\alpha\beta j l}^0 \frac{\partial^2}{\partial x_j \partial x'_l} \delta(\vec{r} - \vec{r}') \delta(t - t'). \end{aligned} \quad (2.108)$$

Si consideramos que la función de autocorrelación de (2.105) es

$$\langle F_\alpha(\vec{r}, t) F_\beta(\vec{r}', t') \rangle = \frac{1}{\rho_0 A} \frac{\partial^2}{\partial x_\gamma \partial x'_\epsilon} \langle \Sigma_{\alpha\gamma}(\vec{r}, t) \Sigma_{\beta\epsilon}(\vec{r}', t') \rangle, \quad (2.109)$$

al igualar (2.108) y (2.109), se obtiene

$$\langle \Sigma_{\alpha j}(\vec{r}, t) \Sigma_{\beta l}(\vec{r}', t') \rangle = 2k_B T_0 \nu_{\alpha\beta j l}^0 \delta(\vec{r} - \vec{r}') \delta(t - t'). \quad (2.110)$$

Por otra parte, el segundo se obtiene sustituyendo Q_{55} de (2.104) en (2.83),

$$\begin{aligned} \langle F_5(\vec{r}, t) F_5(\vec{r}', t') \rangle &= 2Q_{55} \delta(\vec{r} - \vec{r}') \delta(t - t') \\ &= \frac{2k_B T_0}{A} \frac{1}{\rho_0 C} \kappa_{ij}^0 \frac{\partial^2}{\partial x_i \partial x'_j} \delta(\vec{r} - \vec{r}') \delta(t - t'). \end{aligned} \quad (2.111)$$

Como la función de autocorrelación de (2.105) es

$$\langle F_2(\vec{r}, t) F_2(\vec{r}', t') \rangle = \left(\frac{1}{\rho_0 T_0 AC}\right) \frac{\partial^2}{\partial x_i \partial x'_j} \langle \pi_i(\vec{r}, t) \pi_j(\vec{r}', t') \rangle, \quad (2.112)$$

la comparación de (2.111) con (2.112), permite obtener

$$\langle \pi_i(\vec{r}, t) \pi_j(\vec{r}', t') \rangle = 2k_B (T_0)^2 \kappa_{ij}^0 \delta(\vec{r} - \vec{r}') \delta(t - t'). \quad (2.113)$$

⁴En la Subsección 2.3.4. se da una interpretación física de las fuerzas estocásticas $\Sigma_{\alpha\beta}$, π_l y Υ_μ .

Finalmente, el tercero se encuentra al insertar $Q_{\mu\nu}$ de (2.104) en (2.83), para hallar

$$\begin{aligned}\langle F_\mu(\vec{r}, t) F_\nu(\vec{r}', t') \rangle &= Q_{\mu\nu} \delta(\vec{r} - \vec{r}') \delta(t - t') \\ &= \frac{2k_B T_0}{A} \rho_0 A \frac{1}{\gamma_1} \delta_{\mu\nu}^0 \delta(\vec{r} - \vec{r}') \delta(t - t').\end{aligned}\quad (2.114)$$

Dado que la función de autocorrelación de (2.105) es

$$\langle F_\mu(\vec{r}, t) F_\nu(\vec{r}', t') \rangle = \rho_0 \langle \Upsilon_\mu(\vec{r}, t) \Upsilon_\nu(\vec{r}', t') \rangle, \quad (2.115)$$

igualando (2.114) con (2.115), se obtiene

$$\langle \Upsilon_\mu(\vec{r}, t) \Upsilon_\nu(\vec{r}', t') \rangle = 2k_B T_0 \frac{1}{\gamma_1} \delta_{\mu\nu}^0 \delta(\vec{r} - \vec{r}') \delta(t - t'). \quad (2.116)$$

Resumiendo, las tres relaciones o teoremas de fluctuación-disipación para un cristal líquido nemático termótopo son

$$\langle \Sigma_{\alpha j}(\vec{r}, t) \Sigma_{\beta l}(\vec{r}', t') \rangle = 2k_B T_0 \nu_{\alpha\beta j l}^0 \delta(\vec{r} - \vec{r}') \delta(t - t'), \quad (2.117)$$

$$\langle \pi_i(\vec{r}, t) \pi_j(\vec{r}', t') \rangle = 2k_B (T_0)^2 \kappa_{ij}^0 \delta(\vec{r} - \vec{r}') \delta(t - t'), \quad (2.118)$$

$$\langle \Upsilon_\mu(\vec{r}, t) \Upsilon_\nu(\vec{r}', t') \rangle = 2k_B T_0 \frac{1}{\gamma_1} \delta_{\mu\nu}^0 \delta(\vec{r} - \vec{r}') \delta(t - t'). \quad (2.119)$$

Los teoremas de fluctuación-disipación (2.117), (2.118) y (2.119), relacionan, respectivamente, a las fuerzas estocásticas $\Sigma_{\alpha j}(\vec{r}, t)$, $\pi_i(\vec{r}, t)$ y $\Upsilon_\mu(\vec{r}, t)$ del nemático con sus parámetros de transporte $\nu_{\alpha\beta j l}^0$, κ_{ij}^0 y $\frac{1}{\gamma_1} \delta_{\mu\nu}^0$. Si bien estos teoremas se han reportado ya en la literatura, la deducción de los mismos no es clara [3]. Aquí éstos se han deducido de una manera sistemática, empleando un formalismo teórico adecuado y bien establecido como lo es el de Fox y Uhlenbreck.

2.3.3. Ecuaciones nematodinámicas fluctuantes linealizadas

Habiendo encontrado la forma explícita de las fuerzas estocásticas F_i , a continuación escribiremos a las ecuaciones fluctuantes linealizadas de un cristal líquido termótopo. De acuerdo con (2.82), al sustituir las fuerzas estocásticas (2.105)-(2.107) en el sistema de ecuaciones (2.53)-(2.56), se obtiene

$$\frac{\partial}{\partial t} a_1 + A^{1/2} \frac{\partial}{\partial x_\alpha} a_\alpha = 0, \quad (2.120)$$

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial t} a_\alpha + A^{1/2} \frac{\partial}{\partial x_\alpha} a_1 - \frac{1}{\rho_0} \nu_{\alpha j \beta l}^0 \frac{\partial^2}{\partial x_j \partial x_l} a_\beta + \frac{B}{\rho_0} \left(\frac{T_0}{C} \right)^{1/2} \frac{\partial}{\partial x_\alpha} a_5 \\ + \frac{1}{2\rho_0 A^{1/2}} \lambda_{kj\alpha}^0 K_{ks\mu r}^0 \frac{\partial^3}{\partial x_j \partial x_s \partial x_r} a_\mu + \left(\frac{1}{\rho_0 A} \right)^{1/2} \frac{\partial}{\partial x_\beta} \Sigma_{\alpha\beta} = 0,\end{aligned}\quad (2.121)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} a_5 + \frac{B}{\rho_0} \left(\frac{T_0}{C} \right)^{1/2} \frac{\partial}{\partial x_\alpha} a_\alpha - \frac{1}{\rho_0 C} \kappa_{ij}^0 \frac{\partial^2}{\partial x_i \partial x_j} a_5 + \left(\frac{1}{\rho_0 T_0 A C} \right)^{1/2} \frac{\partial}{\partial x_l} \pi_l = 0, \quad (2.122)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} a_\mu - \frac{1}{2} A^{1/2} \lambda_{\mu j \alpha}^0 \frac{\partial}{\partial x_j} a_\alpha - \frac{1}{\gamma_1} \delta_{\mu k}^0 K_{kj\mu l}^0 \frac{\partial^2}{\partial x_j \partial x_l} a_\nu + (\rho_0)^{1/2} \Upsilon_\mu = 0, \quad (2.123)$$

de modo que, al reescribir el sistema anterior en términos de las variables fluctuantes $\delta\rho$, δv_i , δT , δn_i a través de (2.49)-(2.52), se encuentra

$$\frac{\partial}{\partial t}\delta\rho + \rho_0\frac{\partial}{\partial x_\alpha}\delta v_\alpha = 0, \quad (2.124)$$

$$\begin{aligned} \rho_0\frac{\partial}{\partial t}\delta v_\alpha + A\frac{\partial}{\partial x_\alpha}\delta\rho - \nu_{\alpha j\beta l}^0\frac{\partial^2}{\partial x_j\partial x_l}\delta v_\beta + B\frac{\partial}{\partial x_\alpha}\delta T \\ + \frac{1}{2}\lambda_{kj\alpha}^0 K_{ks\mu r}^0\frac{\partial^3}{\partial x_j\partial x_s\partial x_r}\delta n_\mu + \frac{\partial}{\partial x_\beta}\Sigma_{\alpha\beta} = 0, \end{aligned} \quad (2.125)$$

$$\rho_0 C\frac{\partial}{\partial t}\delta T + BT_0\frac{\partial}{\partial x_\alpha}\delta v_\alpha - \kappa_{ij}^0\frac{\partial^2}{\partial x_i\partial x_j}\delta T + \frac{\partial}{\partial x_l}\pi_l = 0, \quad (2.126)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}\delta n_\mu - \frac{1}{2}\lambda_{\mu j\alpha}^0\frac{\partial}{\partial x_j}\delta v_\alpha - \frac{1}{\gamma_1}\delta_{\mu k}^0\perp K_{kj\nu l}^0\frac{\partial^2}{\partial x_j\partial x_l}\delta n_\nu + \Upsilon_\mu = 0. \quad (2.127)$$

El sistema de ecuaciones (2.124)-(2.127) resulta aún bastante general, ya que la forma explícita de las cantidades $\nu_{\alpha j\beta l}^0$, $\lambda_{kj\alpha}^0$, $K_{ks\mu r}^0$ depende de la orientación del campo director. Comúnmente, se considera que la orientación inicial del campo director \hat{n}_i^0 se encuentra a lo largo del eje coordenado z . La convención anterior permite escribir a las ecuaciones (2.124)-(2.127) en la forma

$$\frac{\partial}{\partial t}\delta\rho = -\rho_0\nabla_x\delta v_x - \rho_0\nabla_y\delta v_y - \rho_0\nabla_z\delta v_z, \quad (2.128)$$

$$\begin{aligned} \rho_0\frac{\partial}{\partial t}\delta v_x = -c_T^2\nabla_x\delta\rho - \rho_0\beta c_T^2\nabla_x\delta T + [(\nu_2 + \nu_4)\nabla_x^2 + \nu_2\nabla_y^2 + \nu_3\nabla_z^2]\delta v_x + \nu_4\nabla_x\nabla_y\delta v_y \\ + (\nu_3 + \nu_5)\nabla_z\nabla_x\delta v_z - \frac{1}{2}(\lambda + 1)(K_1\nabla_x^2 + K_2\nabla_y^2 + K_3\nabla_z^2)\nabla_z\delta n_x \\ - \frac{1}{2}(\lambda + 1)(K_1 - K_2)\nabla_z\nabla_x\nabla_y\delta n_y(\vec{r}, t) + \nabla_x\Sigma_{xx} + \nabla_y\Sigma_{xy} + \nabla_z\Sigma_{xz}, \end{aligned} \quad (2.129)$$

$$\begin{aligned} \rho_0\frac{\partial}{\partial t}\delta v_y = -c_T^2\nabla_y\delta\rho - \rho_0\beta c_T^2\nabla_y\delta T + \nu_4\nabla_y\nabla_x\delta v_x + [\nu_2\nabla_x^2 + (\nu_2 + \nu_4)\nabla_y^2 + \nu_3\nabla_z^2]\delta v_y \\ + (\nu_3 + \nu_5)\nabla_z\nabla_y\delta v_z - \frac{1}{2}(\lambda + 1)(K_1 - K_2)\nabla_z\nabla_x\nabla_y\delta n_x \\ - \frac{1}{2}(\lambda + 1)(K_2\nabla_x^2 + K_1\nabla_y^2 + K_3\nabla_z^2)\nabla_z\delta n_y + \nabla_x\Sigma_{yx} + \nabla_y\Sigma_{yy} + \nabla_z\Sigma_{yz}, \end{aligned} \quad (2.130)$$

$$\begin{aligned} \rho_0\frac{\partial}{\partial t}\delta v_z = -c_T^2\nabla_z\delta\rho - \rho_0\beta c_T^2\nabla_z\delta T + (\nu_3 + \nu_5)\nabla_z\nabla_x\delta v_x + (\nu_3 + \nu_5)\nabla_z\nabla_y\delta v_y + [\nu_3(\nabla_x^2 + \nabla_y^2) \\ + (2\nu_1 + \nu_2 - \nu_4 + 2\nu_5)\nabla_z^2]\delta v_z - \frac{1}{2}(\lambda - 1)[K_1(\nabla_x^2 + \nabla_y^2) + K_3\nabla_z^2]\nabla_x\delta n_x \\ - \frac{1}{2}(\lambda - 1)[K_1(\nabla_x^2 + \nabla_y^2) + K_3\nabla_z^2]\nabla_y\delta n_y + \nabla_x\Sigma_{zx} + \nabla_y\Sigma_{zy} + \nabla_z\Sigma_{zz}, \end{aligned} \quad (2.131)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}\delta T = -\frac{\beta T_0 c_T^2}{c_v}\nabla_x\delta v_x - \frac{\beta T_0 c_T^2}{c_v}\nabla_y\delta v_y - \frac{\beta T_0 c_T^2}{c_v}\nabla_z\delta v_z + \gamma\left[\chi_\perp(\nabla_x^2 + \nabla_y^2) + \chi_\parallel\nabla_z^2\right]\delta T \\ - \frac{1}{\rho_0 c_v}\nabla_x\pi_x - \frac{1}{\rho_0 c_v}\nabla_y\pi_y - \frac{1}{\rho_0 c_v}\nabla_z\pi_z, \end{aligned} \quad (2.132)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \delta n_x &= \frac{1}{2} (\lambda - 1) \nabla_x \delta v_z + \frac{1}{2} (\lambda + 1) \nabla_z \delta v_x + \frac{1}{\gamma_1} (K_1 - K_2) \nabla_x \nabla_y \delta n_y \\ &\quad + \frac{1}{\gamma_1} (K_1 \nabla_x^2 + K_2 \nabla_y^2 + K_3 \nabla_z^2) \delta n_x + \Upsilon_x, \end{aligned} \quad (2.133)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \delta n_y &= \frac{1}{2} (\lambda + 1) \nabla_z \delta v_y + \frac{1}{2} (\lambda - 1) \nabla_y \delta v_z + \frac{1}{\gamma_1} (K_1 - K_2) \nabla_x \nabla_y \delta n_x \\ &\quad + \frac{1}{\gamma_1} (K_2 \nabla_x^2 + K_1 \nabla_y^2 + K_3 \nabla_z^2) \delta n_y + \Upsilon_y. \end{aligned} \quad (2.134)$$

en donde se han empleado las definiciones (2.44)-(2.46), el coeficiente de difusividad térmico $\chi_i \equiv \kappa_i / \rho c_p$ con $i = \parallel, \perp$ (siendo c_p el calor específico a presión constante, el cual satisface la relación $\gamma = c_p / c_v$) y las notaciones $\partial / \partial x_i = \nabla_i$, $\partial^2 / \partial x_i^2 = \nabla_i^2$ con $i = x, y, z$. Cabe señalar que las fuerzas estocásticas $\Sigma_{\alpha\beta}$, π_l y Υ_μ definidas en (2.105)-(2.107) y, que aparecen explícitamente en el conjunto de ecuaciones anteriores, respectivamente, tienen las mismas dimensiones que la corriente tensorial de cantidad de movimiento σ'_{ij} , la vectorial de flujo de calor q_i y la cuasicorriente del campo director \mathcal{N}_i .

2.3.4. Interpretación según la formulación de Landau y Lifshitz

Siguiendo el enfoque de la hidrodinámica fluctuante formulada por Landau y Lifshitz [5] para un fluido simple, la descripción de las fluctuaciones de un fluido nemático en un estado de equilibrio debería tomar en cuenta los procesos disipativos asociados con la viscosidad, la conducción térmica y la orientación del director. Estos procesos irreversibles, están caracterizados por el tensor de esfuerzos σ'_{ij} , el flujo de calor q_l y la cuasicorriente del director \mathcal{N}_i ; en particular, de (1.153), (1.156) y (1.159) puede verse que estas cantidades están relacionadas, respectivamente, con gradientes de velocidad, de temperatura y con el campo molecular. Sin embargo, cuando se tienen fluctuaciones en el medio nemático, también existen flujos espontáneos locales de los esfuerzos, de calor y de orientación del director que no están vinculados con estos gradientes ni con el campo molecular; estas cantidades “aleatorias”, que dan lugar a las fluctuaciones de todas las variables hidrodinámicas, pueden identificarse precisamente con las fuerzas estocásticas Σ_{ij} , π_i y Υ_i . Por consiguiente, de acuerdo con Landau y Lifshitz, resulta natural añadir aditivamente a $\Sigma_{\alpha\beta}$, π_l y Υ_μ las corrientes y la cuasicorriente dadas, respectivamente, por (1.153), (1.156) y (1.159) para obtener

$$\sigma'_{ij} = \nu_{ijklm} \partial_m v_l + \Sigma_{ij}, \quad (2.135)$$

$$q_i = -\kappa_{ik} \partial_k T + \pi_l, \quad (2.136)$$

$$\mathcal{N}_i = \frac{1}{\gamma_1} \delta_{ik}^\perp h_k + \Upsilon_i. \quad (2.137)$$

De esta manera, mediante las expresiones (2.135)-(2.137) y la formulación de Onsager y Machlup, pueden hallarse las relaciones de fluctuación-disipación (2.117)-(2.119), además de las ecuaciones nemáticas fluctuantes estocásticas lineales (2.128)-(2.134). Este es el procedimiento que se ha seguido en los escasos intentos reportados en la literatura [3], [52] para obtener tales resultados.

No obstante, esta metodología es incorrecta, porque la descripción hidrodinámica de un fluido involucra, simultáneamente, variables que son funciones pares e impares del tiempo. El marco teórico adecuado para el estudio de las fluctuaciones hidrodinámicas, es la teoría generalizada de procesos gaussianos y markovianos de Fox y Uhlenbeck. Este formalismo es mucho más general, consistente y sistemático, ya que nos permite incorporar a cualquier variable hidrodinámica involucrada independientemente del tipo de paridad temporal que presente; además, nos indica la manera en que deben añadirse las fuerzas estocásticas $\Sigma_{\alpha\beta}$, π_l y Υ_μ en las ecuaciones de conservación y de balance del sistema, y en consecuencia, deducirse de forma natural y consistente las relaciones de fluctuación-disipación correspondientes.

Capítulo 3

Dispersión de luz y factor de estructura dinámico

3.1. Introducción

La capacidad de las moléculas de un cristal líquido para dispersar la luz depende en gran medida de las orientaciones y fluctuaciones del eje director y su configuración bajo campos aplicados. Sin embargo, hay procesos de dispersión de la luz que se producen a nivel molecular que implican las respuestas electrónicas de las moléculas. En este capítulo se discuten los fundamentos y algunas de las técnicas utilizadas para analizar los procesos de dispersión de luz en líquidos en general, y en particular, en cristales líquidos.

Las aproximaciones al problema de la dispersión de la luz en cristales líquidos se pueden clasificar en dos categorías [93]. En una categoría que incluye las dispersiones de Brillouin y Raman, es necesario el conocimiento de propiedades físicas moleculares, tales como resonancias y estructuras de nivel de energía. Por otra parte, en una segunda categoría, en la formulación electromagnética clásica de la dispersión de luz, sólo se requiere conocer las constantes dieléctricas ópticas y sus fluctuaciones. El primer enfoque queda completamente fuera de los propósitos y alcances del presente trabajo de investigación; por tal motivo, en este capítulo se seguirá el segundo, el cual comúnmente se utiliza para analizar las fluctuaciones orientacionales en cristales líquidos.

Los procesos de dispersión de la luz también se pueden dividir en regímenes lineales y no lineales. En la óptica lineal las propiedades de los cristales líquidos no se ven afectadas por la luz incidente, que puede considerarse como un campo o señal de prueba. La luz dispersada resultante, en términos de su intensidad y espectro de frecuencia espacial o temporal, refleja las propiedades físicas del material. Por otro lado, en el régimen óptico no lineal la luz incidente interactúa fuertemente con el medio material y modifica sus propiedades; la luz dispersada resultante reflejará estas fuertes interacciones. En esta investigación nos centraremos en procesos de dispersión ópticos lineales.

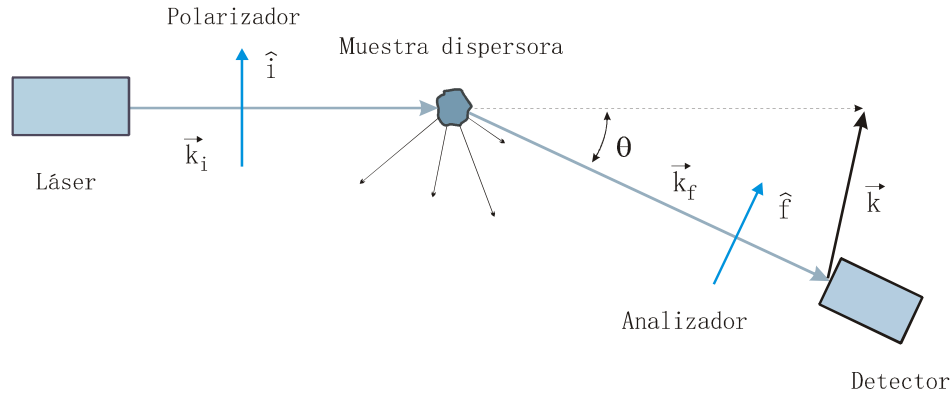


Figura 3.1: Representación esquemática de un experimento típico de dispersión de luz. Consta de fuente de luz monocromática (láser), polarizador, muestra dispersora, analizador y detector.

Cabe señalar que la teoría de dispersión de luz resulta una herramienta poderosa en la que a partir del análisis de los cambios en la frecuencia, de la distribución angular, la polarización y de la intensidad que experimenta la luz dispersada por un medio material, permite obtener información de la estructura y de la dinámica moleculares de tal sustancia, así como de las constantes elásticas y de transporte.

3.2. Teoría general de dispersión de luz

En un experimento típico de dispersión de luz, la luz monocromática proveniente de un láser se hace pasar a través de un polarizador (para establecer la polarización inicial) y se proyectan sobre un medio material dispersor. La luz dispersada, a su vez, se hace pasar a través de un analizador con el cual se selecciona una polarización dada, y finalmente se dirige a un detector. La posición del detector determina el ángulo de dispersión θ , tal como se ilustra en la Figura 3.1.

Las moléculas de la muestra iluminada por el haz incidente se encuentran en un movimiento traslacional, rotacional y vibracional en virtud de sus interacciones térmicas. Debido a este movimiento incesante, la posición de las cargas de las moléculas están constantemente cambiando, de manera que el campo eléctrico total dispersado registrado por el detector fluctuará en el tiempo. Dichas fluctuaciones llevan implícitamente información estructural y dinámica importante de la posición y las orientaciones moleculares del medio dispersor. Precisamente, la teoría de dispersión de luz deduce información a partir de las fluctuaciones del campo eléctrico dispersado. Dado que el medio dispersor presenta fluctuaciones térmicas, ocasionadas por el movimiento errático y azaroso de sus moléculas, el campo eléctrico total dispersado en el detector variará aleatoriamente. De esta manera, no resulta extraño que una teoría de fluctuaciones resulte de lo más conveniente en el estudio de la espectroscopía de dispersión de luz.

Se considerará un experimento ideal de dispersión de luz, en el que se tiene un medio material dispersor no magnético, no conductor, no absorbente y con un coeficiente dieléctrico promedio ϵ_0 . El campo eléctrico

incidente, \vec{E}_i , es una onda plana

$$\vec{E}_i(\vec{r}, t) = \hat{i}E_0 \exp \left[i \left(\vec{k}_i \cdot \vec{r} - \omega_i t \right) \right], \quad (3.1)$$

en donde \hat{i} es un vector unitario en la dirección del campo eléctrico incidente, E_0 es la amplitud del campo, \vec{k}_i es su vector de propagación o vector de onda y ω_i es su frecuencia angular. Al interactuar el campo eléctrico con el medio dispersor, ejerce fuerzas sobre las cargas eléctricas de sus moléculas y en consecuencia las acelera. De acuerdo con la teoría electromagnética clásica, este campo polariza las moléculas del medio y los dipolos oscilantes resultantes emiten radiación electromagnética. Cuando el haz visible de luz incide en un medio material, los átomos de una subregión del volumen iluminado, pequeña comparada con el cubo de la longitud de onda del haz incidente, sentirán esencialmente la presencia del mismo campo eléctrico. Si consideramos varias subregiones de igual tamaño, entonces el campo eléctrico dispersado es la superposición de los campos eléctricos dispersados por cada una de las subregiones mencionadas. Si dichas subregiones son ópticamente idénticas, esto es, que cada una tenga el mismo tensor dieléctrico, entonces no se tendrá dispersión de luz en otra dirección que no sea la del haz incidente. El efecto anterior se produce debido a que las ondas de luz dispersadas por cada subregión son idénticas excepto por un factor de fase que depende de la posición relativa de ellas. Si ignoramos los efectos de superficie, es claro que para un medio material, cada subregión siempre puede estar en correspondencia con otra cuyo campo eléctrico dispersado sea idéntico en amplitud, pero de fase opuesta, de modo que puedan cancelarse, permitiendo únicamente que exista luz dispersada en la dirección del haz incidente. Sin embargo, si las subregiones son ópticamente diferentes, es decir, que presentan tensores dieléctricos distintos, entonces las amplitudes de la luz dispersada por cada una de éstas no serán idénticas, ni tendrá lugar una cancelación completa y habrá dispersión de luz en otras direcciones además de la del haz incidente. De acuerdo con este punto de vista semimacroscópico introducido por vez primera por Einstein, la dispersión de luz es el resultado de las fluctuaciones a nivel local del tensor dieléctrico del medio dispersor [113]. Debido al movimiento continuo de traslación y de rotación de las moléculas, el tensor dieléctrico instantáneo de una subregión dada, que corresponde a posiciones y orientaciones de las moléculas, fluctuará y, por lo tanto, dispersará luz. Por lo tanto, la dispersión de luz se origina a partir de la presencia de inhomogeneidades en la constante dieléctrica del medio. La intensidad de la luz dispersa depende de la magnitud de las fluctuaciones dieléctricas, mientras que su frecuencia se ve afectada por su comportamiento temporal.

El tensor dieléctrico del medio señalado a nivel local se escribe como

$$\epsilon_{\alpha\beta}(\vec{r}, t) = \epsilon_0 I_{\alpha\beta} + \delta\epsilon_{\alpha\beta}(\vec{r}, t), \quad (3.2)$$

en donde $I_{\alpha\beta}$ es un tensor unitario de segundo rango y $\delta\epsilon_{\alpha\beta}(\vec{r}, t)$ son las fluctuaciones del tensor dieléctrico en la posición \vec{r} y al instante t . Puede mostrarse [12] que la magnitud del campo eléctrico dispersado, \vec{E}_s , con vector de propagación \vec{k}_f , frecuencia angular ω_f , polarización a lo largo del vector unitario \hat{f} y a una gran distancia R del medio dispersor de volumen V , se escribe en la forma

$$E_s(R, t) = \frac{-k_f^2 E_0}{4\pi R \epsilon_0} \exp \left[i(\vec{k}_f \cdot \vec{R} - \omega_f t) \right] \delta\epsilon_{if}(\vec{k}, t), \quad (3.3)$$

en donde

$$\begin{aligned}\delta\epsilon_{if}(\vec{k}, t) &\equiv \hat{f} \cdot \delta\vec{\epsilon}(\vec{k}, t) \cdot \hat{i} \\ &= \left(\hat{f}\right)_\alpha \delta\epsilon_{\alpha\beta}(\vec{k}, t) \left(\hat{i}\right)_\beta\end{aligned}\quad (3.4)$$

es la componente de las fluctuaciones del tensor dieléctrico a lo largo de las direcciones de polarización inicial y final, y además

$$\delta\epsilon_{\alpha\beta}(\vec{k}, t) = \int_V \delta\epsilon_{\alpha\beta}(\vec{r}, t) \exp\left(i\vec{k} \cdot \vec{r}\right) d^3r \quad (3.5)$$

es la transformada espacial de Fourier de las fluctuaciones dieléctricas. El vector \vec{k} está definido de la geometría de dispersión como $\vec{k} \equiv \vec{k}_i - \vec{k}_f$, en donde el plano en el que se encuentran los vectores \vec{k}_i , \vec{k}_f y \vec{k} recibe el nombre de plano de dispersión (que se denotará como P), y el ángulo formado entre \vec{k}_i y \vec{k}_f es el ángulo de dispersión θ . Las magnitudes de \vec{k}_i y \vec{k}_f son, respectivamente, $|\vec{k}_i| = 2\pi n/\lambda_i$ y $|\vec{k}_f| = 2\pi n/\lambda_f$, en donde λ_i y λ_f son las longitudes de onda en el vacío de los haces incidente y dispersado, y $n \simeq \sqrt{\epsilon_0}$ es el índice de refracción del medio dispersor. La ecuación (3.3) representa la suma de las ondas desplazadas en fase emitidas desde diferentes partes a través del volumen V del medio de dispersión.

En la ecuación (3.3), se asume que la frecuencia angular de la luz dispersada es básicamente la misma que la de la luz incidente. Esta es una suposición razonable, si las fluctuaciones dominantes del medio dispersan la luz cuasielásticamente. En experimentos de dispersión de luz en fluidos isótropos es usual que la longitud de onda de la luz incidente cambie muy poco durante el proceso de dispersión, de modo que $|\vec{k}_i| \cong |\vec{k}_f|$; consecuentemente, puede mostrarse que

$$k \equiv 2k_i \sin \frac{\theta}{2}. \quad (3.6)$$

Esta expresión puede interpretarse como la condición de Bragg que caracteriza a las componente del vector de onda de las fluctuaciones del tensor dieléctrico que dará lugar a la dispersión de luz a un ángulo θ dado.

3.2.1. Geometrías de dispersión

Generalmente en experimentos de dispersión de luz se emplean ciertas geometrías específicas [12], las cuales toman en consideración tanto las direcciones de los vectores de onda \vec{k}_i y \vec{k}_f como las polarizaciones \hat{i} y \hat{f} de los haces de luz incidente y dispersado que tienen respecto al plano de dispersión P , tal como se ilustra en la Figura 3.2. Así, por ejemplo, si $\hat{i} \perp P$ y $\hat{f} \parallel P$, la geometría es vertical-horizontal y se denota como $V-H$; de este modo, de acuerdo con las relaciones restantes que guardan \hat{i} y \hat{f} con P , las demás geometrías son: $\hat{i} \perp P$ y $\hat{f} \perp P$ ($V-V$), $\hat{i} \parallel P$ y $\hat{f} \parallel P$ ($H-H$), y $\hat{i} \parallel P$ y $\hat{f} \perp P$ ($H-V$).

3.2.2. Metodos de detección experimentales

En experimentos modernos de dispersión de luz se emplean fuentes altamente monocromáticas, así como polarizadores y analizadores para definir la polarización, respectivamente, de los haces incidente y disper-

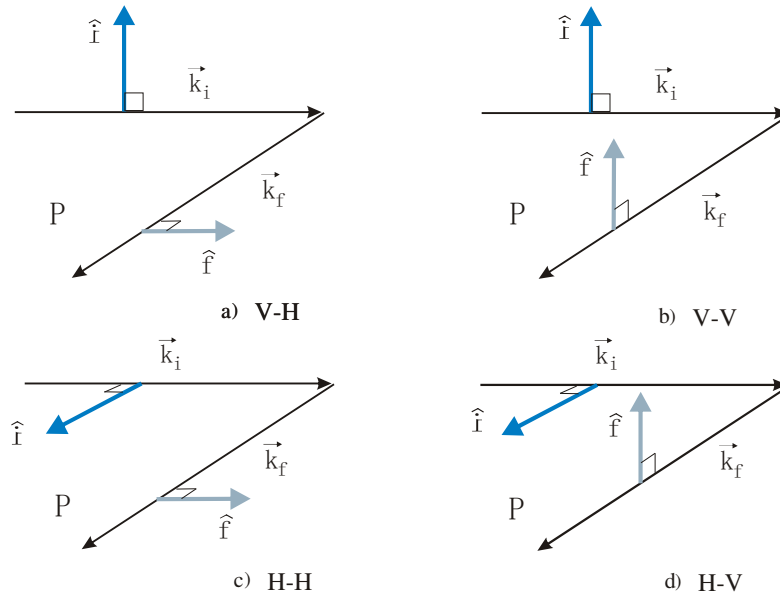


Figura 3.2: Geometrías comúnmente utilizadas en experimentos de dispersión de luz. En ellas se consideran los vectores de onda incidente \vec{k}_i y dispersado \vec{k}_f (que se encuentran en el plano de dispersión P), así como sus correspondientes polarizaciones \hat{i} y \hat{f} . Las geometrías son: a) $\hat{i} \perp P$ y $\hat{f} \parallel P$ (V-H), b) $\hat{i} \perp P$ y $\hat{f} \perp P$ (V-V), c) $\hat{i} \parallel P$ y $\hat{f} \parallel P$ (H-H) y d) $\hat{i} \parallel P$ y $\hat{f} \perp P$ (H-V).

sado. La distribución espectral de luz dispersada se mide con un detector, siendo el principal un fotomultiplicador; en tanto que los sistemas pre y post fotomultiplicadores, son diferentes dependiendo del cambio de la frecuencia de la luz dispersada. El campo dispersado instantáneo puede considerarse físicamente como la superposición de ondas dispersadas a partir de sus centros dispersores individuales; en consecuencia, este campo dispersor fluctúa en respuesta a los movimientos moleculares de éstos. En el análisis experimental de la dependencia temporal de las fluctuaciones, son tres los métodos de detección comúnmente utilizados: los métodos de filtrado y los de mezcla óptica o de golpeteo (que a su vez se dividen en homodinos y heterodinos); su selección depende de la escala temporal de las mismas. Así, por ejemplo, los métodos de filtrado se usan para estudiar procesos moleculares dinámicos relativamente rápidos, esto es, aquellos que ocurren en una escala de tiempo más rápida que 10^{-6} s. Por otra parte, los métodos de mezcla óptica o de golpeteo se utilizan usualmente para procesos que ocurren en escalas de tiempo más lentos que 10^{-6} s.

Los métodos de mezcla óptica han permitido aplicar la dispersión de luz en el estudio de la dinámica de procesos relativamente lentos como la difusión macromolecular, la dinámica de las fluctuaciones en la región crítica y la motilidad de los microorganismos [12]. En estos métodos, no se utiliza un monocromador o “filtro” entre en medio dispersor y el fotomultiplicador, ya que la luz dispersada impacta directamente sobre el cátodo de este último. En los métodos homodinos (o de auto golpeteo) únicamente la luz dispersada incide el fotocátodo, mientras que en los heterodinos, una porción pequeña del haz láser no dispersado se mezcla con la luz dispersada en la superficie del cátodo.

3.2.3. Densidad espectral y factor de estructura dinámico

La densidad espectral (o espectro de potencia) $I_B(\omega)$, de una propiedad B de un sistema, se define como [12]

$$I_B(\omega) \equiv \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \langle B(t)B^*(0) \rangle \exp(-i\omega t) dt, \quad (3.7)$$

en donde $\langle B(t)B^*(0) \rangle$ es la función de autocorrelación de dicha propiedad, el superíndice * denota complejo conjugado y $\langle \dots \rangle$ indica el promedio en el estado de equilibrio. La propiedad B depende de la posición y cantidad de movimiento de todas las partículas del sistema. En virtud de sus movimientos térmicos, éstas se encuentran constantemente colisionando entre sí de manera que sus posiciones y cantidades de movimiento cambian en el tiempo, así como también B . El gran número de partículas hacen que la dinámica de B sea aleatoria, de modo que su dependencia temporal generalmente se asemeja a un patrón de ruido. En la medida que transcurre el tiempo, B fluctúa alrededor de su promedio temporal.

En las mediciones de dispersión de luz estática y dinámica, una cantidad importante es la función de correlación temporal $C_E(\vec{k}, t)$ del campo eléctrico dispersado $\vec{E}_s(R, t)$, a saber,

$$C_E(\vec{k}, t) \equiv \langle \vec{E}_s(R, t) \cdot \vec{E}_s^*(R, 0) \rangle, \quad (3.8)$$

que a partir de (3.3), toma la forma

$$C_E(\vec{k}, t) = \frac{k_f^4 I_0}{16\pi^2 R^2 \epsilon_0^2} \langle \delta\epsilon_{if}(\vec{k}, t) \delta\epsilon_{if}^*(\vec{k}, 0) \rangle \exp(-i\omega_i t), \quad (3.9)$$

en donde $I_0 = |E_0|^2$ es la intensidad de la luz incidente. La densidad espectral de la luz dispersada en el detector tal que $(\hat{n}_i, \vec{k}_i, \omega_i) \rightarrow (\hat{n}_f, \vec{k}_f, \omega_f)$, puede ser determinada al sustituir (3.9) en (3.7) resultando [12]

$$I_{if}(\vec{k}, \omega_f, R) \equiv \frac{k_f^4 I_0}{16\pi^2 R^2 \epsilon_0^2} \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \langle \delta\epsilon_{if}(\vec{k}, t) \delta\epsilon_{if}^*(\vec{k}, 0) \rangle \exp(-i\omega t) dt, \quad (3.10)$$

en donde $\omega \equiv \omega_i - \omega_f$ es el cambio de frecuencia que se produce durante el proceso de dispersión de luz. Al observar la expresión (3.10), se concluye que ocurren cambios en la frecuencia sólo si $\delta\epsilon_{if}(\vec{k}, t)$ varía en el tiempo. Obsérvese que en (3.10) $I_{if}(\vec{k}, \omega_f, R)$ es proporcional a la densidad espectral

$$I_{if}^e(\vec{k}, \omega) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \langle \delta\epsilon_{if}(\vec{k}, t) \delta\epsilon_{if}^*(\vec{k}, 0) \rangle \exp(-i\omega t) dt. \quad (3.11)$$

Denotaremos a la función de autocorrelación de $\delta\epsilon_{if}(\vec{k}, t)$ como

$$I_{if}^e(\vec{k}, t) \equiv \langle \delta\epsilon_{if}(\vec{k}, t) \delta\epsilon_{if}^*(\vec{k}, 0) \rangle. \quad (3.12)$$

De esta manera, un evento dispersivo que produzca un cambio \vec{k} en el vector de onda y un cambio ω en la frecuencia, será ocasionado completamente por las fluctuaciones del tensor dieléctrico de vector de onda \vec{k} y frecuencia ω . Es importante mencionar que la ecuación (3.11) es una expresión para la densidad espectral de luz dispersada en términos de las fluctuaciones del tensor dieléctrico. En ninguna parte de su deducción

fue necesario determinar la dependencia explícita de estas fluctuaciones con las propiedades moleculares del sistema; de hecho, esta expresión teórica es puramente fenomenológica.

Las expresiones halladas para el campo eléctrico dispersado (3.10) y (3.11) están escritas en una notación tensorial general, por lo que son independientes del sistema coordenado que se seleccione. No obstante, resulta conveniente en muchas aplicaciones utilizar las geometrías de dispersión específicas señaladas con anterioridad e ilustradas en la Figura 3.2. Así, por ejemplo, si se considera la configuración $\hat{i} \perp P$ y $\hat{f} \perp P$, la densidad espectral se denota como $I_{VV}(\vec{k}, \omega)$ y recibe el nombre de componente polarizada; del resto de esas geometrías, las densidades espectrales $I_{HV}(\vec{k}, \omega)$ y $I_{VH}(\vec{k}, \omega)$ se denominan como componentes depolarizadas. En algunos sistemas ocurre que $I_{HV} = I_{VH}$, y la componente I_{HH} resulta ser una combinación lineal de I_{VV} y I_{VH} .

Cabe señalar que al integrar el espectro $I_{if}^\epsilon(\vec{k}, \omega)$ sobre todas las frecuencias, esto es, al encontrar el área debajo del espectro, se obtiene

$$I_{if}^\epsilon(\vec{k}) = \int_{-\infty}^{\infty} I_{if}^\epsilon(\vec{k}, \omega) d\omega = \left\langle \left| \delta\epsilon_{if}(\vec{k}) \right|^2 \right\rangle. \quad (3.13)$$

Por lo tanto, las intensidades integradas proporcionan información, al mismo tiempo, sobre las fluctuaciones cuadráticas medias de $\overleftarrow{\epsilon}$ para vectores de onda dados [12]. Obérvase que al hacer en (3.10), $t = 0$, $I_{if}(\vec{k}, \omega_f, R)$ es proporcional a $I_{if}^\epsilon(\vec{k})$. En este caso la densidad espectral puede medirse directamente por cualquier fotodetector adecuado, tal como un tubo fotomultiplicador. El tubo fotomultiplicador es un ejemplo de un detector de ley cuadrada, en el que la salida instantánea es proporcional al cuadrado del campo eléctrico y, por lo tanto, proporcional a la intensidad de la luz en el fotocátodo [114].

Se ha mencionado ya que nuestro interés se centra en el estudio de la luz dispersada por sistemas hidrodinámicos en los que sus moléculas vecinas están altamente correlacionadas con respecto a sus distribuciones espaciales y a sus movimientos relativos, como es el caso de los líquidos puros, las mezclas líquidas y en general de los fluidos complejos. En este caso resulta más preciso [12] utilizar la densidad espectral $I_{if}^\epsilon(\vec{k}, \omega)$ dada por la ecuación (3.11), la cual involucra las fluctuaciones de las transformadas de Fourier espaciales de las fluctuaciones dieléctricas de estos sistemas. Esta cantidad es directamente proporcional al *factor de estructura dinámico* $S(\vec{k}, \omega)$, el cual contiene la información dinámica relevante del sistema y además es lo que comúnmente se mide en experimentos de dispersión de luz [1]. Dado que se trabajará con factores de estructura dinámicos normalizados, la forma explícita de la constante de proporcionalidad entre $S(\vec{k}, \omega)$ e $I_{if}^\epsilon(\vec{k}, \omega)$ carece de importancia; por consiguiente, en lo sucesivo identificaremos a la ecuación (3.11) con $S(\vec{k}, \omega)$, es decir,

$$S(\vec{k}, \omega) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \left\langle \delta\epsilon_{if}(\vec{k}, t) \delta\epsilon_{if}^*(\vec{k}, 0) \right\rangle \exp(-i\omega t) dt. \quad (3.14)$$

El factor de estructura dinámico, para un ángulo de dispersión dado (a una \vec{k} fija) y como función de ω , permite obtener el espectro de dispersión de luz del sistema hidrodinámico. No obstante que el cálculo de éste puede ser bastante complicado, su obtención resulta de gran interés debido a que contiene información fundamental del fluido y, en principio, puede ser cotejado con mediciones experimentales.

3.3. Dispersión de luz en un cristal líquido nemático

El descubrimiento de los cristales líquidos fue provocado, al menos en parte, por su sorprendente turbidez causada por la dispersión de la luz, y esta propiedad notable ha sido explotada para dilucidar información valiosa sobre los cristales líquidos desde entonces. Los primeros experimentos de dispersión de luz en cristales líquidos nemáticos por Chatelain [115], mostraron que la dispersión era intensa y que la luz dispersada era en gran parte depolarizada. Fue de Gennes [116] quien primero señaló que la razón de la fuerte dispersión de luz por los nemáticos radica en fluctuaciones espontáneas de las orientaciones moleculares. Las moléculas en la fase nemática en equilibrio están alineadas a lo largo de una dirección promedio. Sin embargo, las fluctuaciones térmicas hacen que las moléculas se desvíen de esta dirección tanto temporal como espacialmente. Estas fluctuaciones de orientación espontáneas producen fluctuaciones en el tensor dieléctrico que está asociado con la anisotropía molecular, haciendo que la luz que pasa a través del cristal líquido se disperse. Debe mencionarse que la dispersión de luz por un cristal líquido también puede resultar de los modos hidrodinámicos habituales, tales como las fluctuaciones de densidad, como se señaló anteriormente para un fluido isótropo convencional; o inclusive, de modos intramoleculares, pero tal dispersión es considerablemente más débil (por un factor $\sim 10^{-6}$) que la causada por las fluctuaciones de la orientación. La luz dispersada dominante en un cristal líquido se puede utilizar así para obtener información sobre la magnitud de las fluctuaciones orientacionales, así como su dinámica. La dispersión de la luz es particularmente poderosa para elucidar las propiedades de los cristales líquidos cerca de las transiciones de fase, ya que se espera que estas fluctuaciones muestren un comportamiento pretransicional pronunciado. Como resultado de las técnicas que se han desarrollado durante los últimos 25 años, la dispersión de la luz ha sido una importante herramienta de laboratorio en la investigación de cristales líquidos [114].

Las expresiones (3.2), (3.3) y (3.4) deducidas mediante la teoría electromagnética para la luz dispersada de un haz incidente por un medio dispersor pueden ser válidas para un cristal líquido nemático. Sin embargo, es importante señalar que la consideración $|\vec{k}_i| \cong |\vec{k}_f|$ que resulta válida para fluidos isótropos y que conduce a la expresión (3.6), generalmente no se cumple en cristales líquidos [114]. Debido a la anisotropía óptica de los cristales líquidos, el índice de refracción depende de la dirección de la polarización y del vector de onda con respecto al eje óptico. Dado que la magnitud del vector de onda es proporcional al índice de refracción, los vectores de onda \vec{k}_i y \vec{k}_f típicamente tienen magnitudes diferentes, y es necesario evaluar el vector de onda de dispersión \vec{k} en cada caso específico de acuerdo con $\vec{k} \equiv \vec{k}_i - \vec{k}_f$.

En experimentos de dispersión de luz con cristales líquidos, usualmente se determina la ubicación de las componentes de \vec{k} con respecto al campo director inicial \vec{n}_0 . Estas componentes de \vec{k} , perpendicular y paralela a \vec{n}_0 , se denotan como k_\perp y k_\parallel , respectivamente, y bajo la suposición de que $|\vec{k}_i| \cong |\vec{k}_f|$ mediante (3.6) puede mostrarse que están escritas en términos de θ como

$$k_\perp = k \cos \frac{\theta}{2} \quad \text{y} \quad k_\parallel = k \sin \frac{\theta}{2}. \quad (3.15)$$

3.3.1. Tensor dieléctrico nemático

La dispersión de luz en un medio es causada por fluctuaciones de su tensor dieléctrico. En líquidos isotrópicos estas fluctuaciones se deben principalmente a fluctuaciones de densidad, causadas por fluctuaciones en la temperatura. Para cristales líquidos en sus fases ordenadas, una contribución adicional y dominante a las fluctuaciones de su tensor dieléctrico surge de las fluctuaciones del eje director. La descripción de la dispersión de luz en la fase nemática debe tomar en consideración su anisotropía, ya que en la mayoría de los cristales líquidos nemáticos no es despreciable [100], y aun en el caso en que ésta sea débil puede dar lugar a una serie de cambios considerables en la intensidad de la luz dispersada en ciertas geometrías comúnmente empleadas experimentalmente [117]. Para este propósito consideraremos un medio nemático dispersivo no magnético, no conductor, ni absorbente y, de acuerdo con la expresión (1.8), con un tensor dieléctrico uniaxial dado, a nivel local, como

$$\epsilon_{\alpha\beta}(\vec{r}, t) = \epsilon_{\perp}\delta_{\alpha\beta} + \epsilon_a n_{\alpha}(\vec{r}, t) n_{\beta}(\vec{r}, t), \quad (3.16)$$

en donde $\epsilon_a \equiv \epsilon_{\parallel} - \epsilon_{\perp}$, es la anisotropía dieléctrica, y ϵ_{\parallel} , ϵ_{\perp} los coeficientes dieléctricos paralelo y perpendicular, respectivamente, al eje óptico determinado por \vec{n}_0 . En general, el análisis de la dispersión de la luz en un medio anisótropo que incluye las variaciones correctas de los índices de refracción con la orientación del haz y la definición adecuada de las intensidades fotométricas es delicado. Por esta razón limitaremos nuestra atención al caso límite en el que ϵ_a es pequeña ($|\epsilon_a| \ll 1$), de modo que tanto los haces entrantes como los salientes pueden describirse como propagándose en un medio isotrópico, es decir, que ambos no se propagan en el interior del nemático. Esta aproximación no es demasiado buena en nemáticos para los cuales ϵ_a no es pequeña (como el PAA, para el cual $\epsilon_a \sim 1$, a $125^{\circ}C$), pero permite una visualización mucho más explícita de las características físicas importantes [46]. En las referencias [117], [118], se realiza un estudio más general de la densidad espectral de la luz dispersada en cristales líquidos nemáticos, para los cuales ϵ_a no es pequeña. Además, no se tomará en consideración la presencia de los efectos de frontera y refracción de la muestra nemática [119].

Escribiremos $\vec{n}(\vec{r}, t) = \vec{n}_0 + \delta\vec{n}(\vec{r}, t)$, en donde $\delta\vec{n}(\vec{r}, t)$ son las desviaciones de $\vec{n}(\vec{r}, t)$ en el estado de equilibrio. Dado que estas fluctuaciones son pequeñas y $\vec{n} \cdot \vec{n} = 1$ tenemos, en una primer aproximación, $\delta\vec{n} \cdot \vec{n}_0 = 0$. Por otra parte, de acuerdo con la ecuación (3.16), las fluctuaciones de $\epsilon_{\alpha\beta}$ pueden provenir de dos fuentes: 1) fluctuaciones en la magnitud de ϵ_{\parallel} y ϵ_{\perp} , debido a cambios pequeños, locales, en la densidad, la temperatura, etc.; y 2) fluctuaciones en la orientación de \vec{n} , que como se verá más adelante, es el efecto dominante. En consecuencia, puede escribirse las desviaciones de este tensor en términos de ambas fuentes como

$$\delta\epsilon_{\alpha\beta} = \delta_{\alpha\beta}\delta\epsilon_{\perp} + n_{\alpha}^0 n_{\beta}^0 \delta\epsilon_a + \epsilon_a n_{\beta}^0 \delta n_{\alpha} + \epsilon_a n_{\alpha}^0 \delta n_{\beta}. \quad (3.17)$$

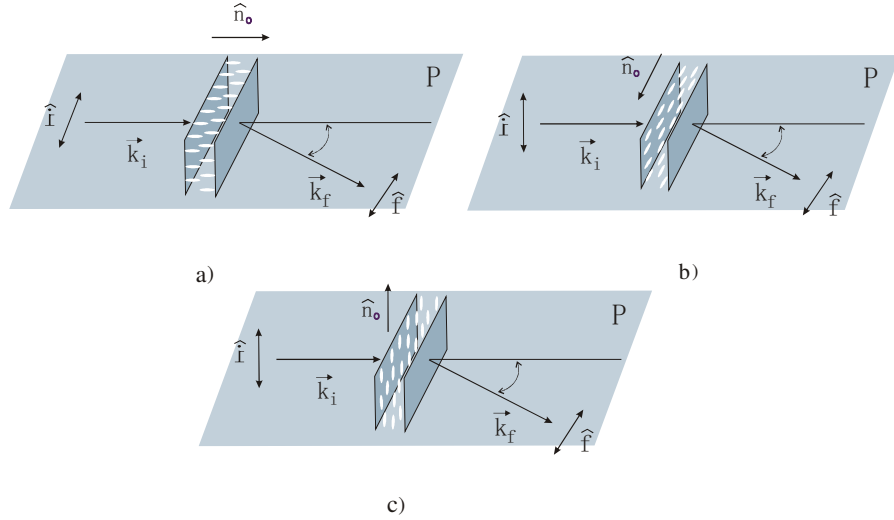


Figura 3.3: Geometrías empleadas generalmente en experimentos de dispersión de luz para nemáticos. En ellas, el haz incidente, de polarización \hat{i} , es perpendicular a las placas, en tanto que el director \hat{n}_0 es perpendicular (homeotrópo) o paralelo (planar) a las mismas. Éstas son: Configuración 1, a) \hat{n}_0 homeotrópo y con \hat{i} ambos paralelos al plano de dispersión P ; y Configuración 2, b) \hat{n}_0 planar paralelo a P e \hat{i} perpendicular a éste, y c) \hat{n}_0 planar y con \hat{i} ambos perpendiculares a P .

La sustitución de (3.17) en (3.4) conduce a la expresión

$$\begin{aligned} \delta\epsilon_{if}(\vec{r}, t) &= (\hat{i})_{\alpha} (\hat{f})_{\alpha} \delta\epsilon_{\perp} + (\hat{i})_{\alpha} n_{\alpha}^0 n_{\beta}^0 (\hat{f})_{\beta} \delta\epsilon_{\alpha} \\ &+ \epsilon_{\alpha} \left[(\hat{i})_{\alpha} \delta n_{\alpha} n_{\beta}^0 (\hat{f})_{\beta} + (\hat{i})_{\alpha} n_{\alpha}^0 \delta n_{\beta} (\hat{f})_{\beta} \right], \end{aligned} \quad (3.18)$$

relación que puede abreviarse en la forma

$$\begin{aligned} \delta\epsilon_{if}(\vec{r}, t) &= \hat{i} \cdot \hat{f} \delta\epsilon_{\perp}(\vec{r}, t) + i_0 f_0 \delta\epsilon_{\alpha}(\vec{r}, t) \\ &+ \epsilon_{\alpha}(\vec{r}, t) \sum_{\alpha=1,2} (i_{\alpha} f_0 + i_0 f_{\alpha}) \delta n_{\alpha}(\vec{r}, t), \end{aligned} \quad (3.19)$$

en la cual las desviaciones $\delta\vec{n}$ se han reescrito como

$$\delta\vec{n} = \delta n_1 \hat{e}_1 + \delta n_2 \hat{e}_2, \quad (3.20)$$

con $\hat{e}_2 \equiv (\vec{n}_0 \times \vec{k}) k_{\perp}^{-1}$ y $\hat{e}_1 \equiv \hat{e}_2 \times \vec{n}_0$, y en donde $i_0 \equiv \hat{i} \cdot \vec{n}_0$, $f_0 \equiv \hat{f} \cdot \vec{n}_0$, $i_{\alpha} \equiv \hat{e}_{\alpha} \cdot \hat{i}$, $f_{\alpha} \equiv \hat{e}_{\alpha} \cdot \hat{f}$. Cabe señalar, que la relación (3.19) no cambia si en ella se intercambia \hat{i} por \hat{f} ; por consiguiente, de acuerdo con (3.4), en este caso $\delta\epsilon_{if}(\vec{k}, t) = \delta\epsilon_{fi}(\vec{k}, t)$.

3.3.2. Geometrías de dispersión y métodos de detección para nemáticos

El fenómeno de dispersión de luz puede analizarse cuantitativamente para obtener parámetros fundamentales de los cristales líquidos. Es útil diferenciar entre experimentos estáticos y dinámicos. En el primer

caso, no se consideran efectos hidrodinámicos y, como consecuencia, no es posible deducir información sobre la viscosidad a partir de los resultados obtenidos. Por otro lado, los experimentos dinámicos determinan el espectro de frecuencia de la luz de dispersión y se puede deducir información sobre las viscosidades de los sistemas líquido cristalinos [87].

La intensidad de la radiación dispersada depende de la configuración geométrica utilizada en el experimento (incluyendo la orientación planar u homeótropa inicial del director en la muestra), el ángulo de detección y las polarizaciones de los haces incidente y dispersado. En experimentos de dispersión de luz estáticos, mediante el análisis de la dependencia angular de la intensidad de la luz dispersada por una muestra nemática en dos configuraciones geométricas específicas, pueden determinarse los cocientes K_1/K_3 y K_2/K_3 que involucran los tres coeficientes elásticos de Frank dados en la expresión (1.26). En la Configuración 1 (splay/bend) (Figura 3.3a), las fluctuaciones sólo pueden contener contribuciones de las distorsiones K_1 (splay) y K_3 (bend); mientras que en la Configuración 2 (twist/bend) (figuras 3.3b y 3.3c), las fluctuaciones ocurren en el plano perpendicular y sólo pueden contener contribuciones de las distorsiones K_2 (twist) y K_3 (bend) [87].

En general, la birrefringencia del material nemático debe ser considerada, debido a que se detecta luz dispersada fuera de la muestra. Algunas situaciones especiales ocurren cuando la luz dispersada no se divide en rayos ordinarios y extraordinarios. Los experimentos de dispersión de luz estática se complican aún más ya que se requieren valores absolutos de la intensidad de la luz dispersada. Podrán utilizarse mediciones de intensidad relativa siempre que el intervalo angular esté restringido a aquellos casos en los que las contribuciones de ambas contribuciones son aproximadamente iguales. Además, las elecciones adecuadas de polarización y geometría permiten desconvolucionar las configuraciones y distorsiones, permitiendo obtener valores para las diversas constantes elásticas [87].

La dispersión dinámica de la luz en cristales líquidos permite deducir las razones viscoelásticas a partir de los datos medidos experimentalmente. Para la luz dispersada por un material, la variación temporal del campo dispersado $\vec{E}_s(R, t)$ en una posición \vec{R} está dada por la ecuación (3.3). En experimentos de detección homodina, sólo la luz dispersada interfiere con el detector (fotocátodo) y la intensidad medida es registrada y manipulada electrónicamente para cuantificar su función de correlación temporal, definida como

$$C_I(\vec{k}, t) = \left\langle I_s(\vec{k}, t) I_s^*(\vec{k}, 0) \right\rangle, \quad (3.21)$$

en donde $I_s(\vec{k}, t) = \vec{E}_s(R, t) \cdot \vec{E}_s^*(R, t)$ es el valor instantáneo de la intensidad del campo eléctrico dispersado. Si el campo óptico dispersado satisface las estadísticas gaussianas, lo cual es usualmente cierto en experimentos realizados con cristales líquidos, las funciones de correlación dependientes del tiempo $C_E(\vec{k}, t)$ y $C_I(\vec{k}, t)$ del campo e intensidad dispersados, respectivamente, están relacionadas entre sí. Esta relación puede expresarse más fácilmente en términos de las funciones de correlación normalizadas de primer y segundo orden definidas como

$$g^{(1)}(t) = \frac{C_E(\vec{k}, t)}{I_s(\vec{k})} \quad (3.22)$$

y

$$g^{(2)}(t) = \frac{C_I(\vec{k}, t)}{I_s^2(\vec{k})}, \quad (3.23)$$

en las cuales $I_s(\vec{k}) = \langle \vec{E}_s(R, 0) \cdot \vec{E}_s^*(R, 0) \rangle$ y además satisfacen la relación de Siegert [114]

$$g^{(2)}(t) = 1 + [g^{(1)}(t)]^2. \quad (3.24)$$

Así, la sustitución de las expresiones (3.9), (3.13) y (3.21), en las definiciones (3.22) y (3.23), considerando la relación (3.24), permite obtener

$$\begin{aligned} C_I(\vec{k}, t) &= I_s^2(\vec{k}) + [C_E(\vec{k}, t)]^2 \\ &= I_s^2(\vec{k}) \left[1 + \frac{\langle \delta\epsilon_{if}(\vec{k}, t) \delta\epsilon_{if}^*(\vec{k}, 0) \rangle^2}{\langle \delta\epsilon_{if}^2(\vec{k}) \rangle^2} \right]. \end{aligned} \quad (3.25)$$

De esta manera, la función de correlación de la intensidad dispersada $C_I(\vec{k}, t)$ contiene dos partes: la primera, dada por un término constante o “cd” que depende de la intensidad promedio; mientras que la segunda, consiste de un término dependiente del tiempo que depende de la función de correlación dieléctrica (3.12) que reescribiremos como

$$C_\epsilon(\vec{k}, t) \equiv \langle \delta\epsilon_{if}(\vec{k}, t) \delta\epsilon_{if}^*(\vec{k}, 0) \rangle. \quad (3.26)$$

Una forma común de $C_\epsilon(\vec{k}, t)$ para la dispersión proveniente de los modos difusivos, es un decaimiento exponencial

$$C_\epsilon(\vec{k}, t) \equiv \langle \delta\epsilon_{if}^2(\vec{k}) \rangle \exp(-\Gamma_d t), \quad (3.27)$$

en donde Γ_d es la tasa de relajación la cual refleja la dinámica de las fluctuaciones dieléctricas. El recíproco de Γ_d recibe usualmente el nombre de *tiempo de correlación*. Por consiguiente, la función de correlación de la intensidad, de acuerdo con (3.25), (3.26) y (3.27), está dada como

$$C_I(\vec{k}, t) \equiv I_s^2(\vec{k}) [1 + \exp(-2\Gamma_d t)]. \quad (3.28)$$

En la detección heterodina, el campo dispersado se mezcla con una porción de luz no dispersada derivada de la misma fuente láser. Los experimentos heterodinicos son técnicamente más difíciles que los homodinicos, y requieren tiempos de detección más largos, pero pueden dar resultados más precisos, ya que no se hacen suposiciones sobre la luz dispersada. Además, las técnicas heterodinicas evitan imprecisiones que pueden darse en experimentos homodinicos que detectan involuntariamente señales parcialmente heterodinicas. De nuevo, las geometrías de los experimentos de dispersión de luz son importantes para definir cuáles de las constantes viscoelásticas serán estudiadas en un experimento particular. La dependencia temporal de la luz dispersada puede relacionarse con los parámetros viscoelásticos mediante las fluctuaciones del director y las distorsiones permitidas del tensor dieléctrico local. Así, por ejemplo, una adecuada elección del sistema coordenado y el

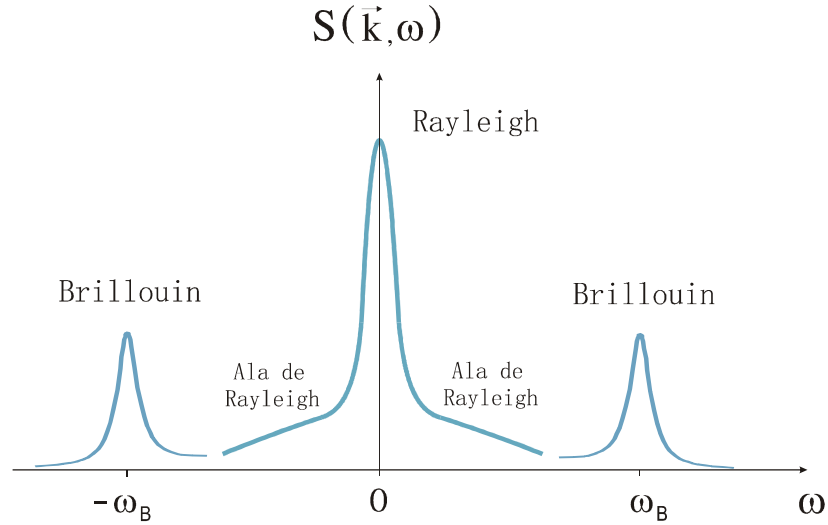


Figura 3.4: Espectro típico de dispersión de luz $S(\vec{k}, \omega)$ de un cristal líquido nemático, en el estado de equilibrio termodinámico. Consta de un pico central de Rayleigh, de mayor intensidad localizado en $\omega = 0$, y de dos picos de Brillouin, simétricamente situados a ambos lados del anterior en $\omega = \pm\omega_B$. Se muestran las alas de Rayleigh, que es una zona ancha en la parte baja del pico central.

arreglo geométrico permite separar las fluctuaciones en la Configuración 1 (splay/bend) y la Configuración 2 (twst/bend). En sistemas nemáticos estas dos configuraciones de fluctuaciones desacopladas son puramente de relajación; en general, la función de autocorrelación del campo dispersado incluye tiempos de relajación que involucran a los coeficientes elásticos de Frank y los de viscosidad de Leslie [87].

3.3.3. Espectro de dispersión de luz en el estado de equilibrio

La sustitución de (3.19) en (3.14) permite hallar la forma explícita del factor de estructura dinámico $S(\vec{k}, \omega)$ y por ende, para valores de \vec{k} fijos, el espectro de dispersión de luz dispersada de una muestra de cristal líquido nemático. En estos sistemas el espectro de luz dispersada se caracteriza por presentar una estructura fina, y los anchos e intensidades relativas de sus diversas líneas o picos proporciona información importante respecto a sus propiedades de transporte y termodinámicas. El espectro de dispersión de luz de un nemático usualmente se obtiene, como se señaló anteriormente, para configuraciones y geometrías muy específicas. En general, para medios nemáticos no absorbentes puros en equilibrio termodinámico, el espectro de luz dispersada presenta la forma ilustrada en la Figura 3.4. El espectro consiste de un pico de dispersión central de Rayleigh localizado en $\omega = 0$ y de dos picos de dispersión de Brillouin ubicados simétricamente a ambos lados del primero en $\omega = \pm\omega_B$. Además, presenta en la parte baja del pico central una base amplia a la que comúnmente se le refiere como *alas de Rayleigh* [93].

La dispersión de Rayleigh se debe a las fluctuaciones de la entropía o de la temperatura, que causan fluctuaciones no propagativas de la densidad y, por lo tanto, de la constante dieléctrica. Por otra parte, la

dispersión de Brillouin es producida por la propagación de ondas de presión (es decir, de sonido) y a menudo es referida como *efecto electrostrictivo* [93]. Un haz de luz láser incidente puede generar ondas de sonido copropagadoras o contrapropagadoras a una frecuencia ω_B . Por lo tanto, el espectro de la luz dispersada consiste en un doblete centrado en $\omega = \pm\omega_B$.

La dispersión de las alas de Rayleigh se debe a las fluctuaciones orientacionales de las moléculas anisótropas. Para líquidos típicos, estas fluctuaciones orientacionales son características de los movimientos de moléculas individuales y se producen en una escala de tiempo muy corta ($\lesssim 10^{-12}s$). En consecuencia, el espectro es bastante amplio. En los cristales líquidos, estudios de dinámica de orientación molecular individual han demostrado que la escala de tiempo de relajación es del orden de los picosegundos [120], por consiguiente, el espaciamiento del ala de Rayleigh para los cristales líquidos es bastante amplio.

En los cristales líquidos, la dispersión principal se debe a fluctuaciones colectivas u orientacionales correlacionadas. Estos, por supuesto, son procesos mucho más lentos que los movimientos moleculares individuales. Por lo tanto, el espectro de estas fluctuaciones correlacionadas u orientacionales colectivas es muy nítido y está incrustado en la región central del pico de Rayleigh.

En la segunda parte de esta tesis, en donde se hacen algunas aplicaciones de la teoría nematodinámica fluctuante desarrollada en el Capítulo 2, se discutirá con más detalle la dinámica de la dispersión orientacional en un cristal líquido nemático sujeto a diferentes estados estacionarios de no equilibrio termodinámico. En particular, en el Capítulo 5 en donde se considera un estado estacionario producido por un gradiente uniforme de temperatura y un campo gravitatorio constante, se estudiarán los mecanismos de la dispersión de Rayleigh los cuales esencialmente son debidos a las fluctuaciones de la entropía; mientras que en el Capítulo 6 en el que se tiene un estado estacionario debido a la presencia de un gradiente de presión constante, se estudiará el espectro de dispersión de luz, en una primera aproximación, producido únicamente por sus variables transversales.

Parte II

**Aplicaciones: Modos hidrodinámicos y
espectros de dispersión de luz de un
nemático en estados estacionarios
fuera de equilibrio termodinámico**

Capítulo 4

Modos hidrodinámicos de un nemático bajo un gradiente de temperatura uniforme y un campo gravitatorio constante externo

4.1. Introducción

Las fluctuaciones térmicas alrededor de los estados de equilibrio homogéneos de los fluidos simples isótropos siempre dan lugar a funciones de correlación de corto alcance a tiempos iguales, excepto cerca de un punto crítico. Las correlaciones decaen exponencialmente más allá de una cierta longitud de correlación ξ de orden microscópico. Sin embargo, cuando se aplican fuerzas disipativas externas como un gradiente térmico, las funciones de correlación de tiempos iguales pueden desarrollar comportamientos espaciales de largo alcance, cuya naturaleza es muy diferente de aquellos en equilibrio. Para una variedad de sistemas en estados de no equilibrio se ha demostrado teóricamente que la existencia de la llamada invariancia de escala genérica es el origen de la naturaleza de largo alcance de las funciones de correlación [29], [121], [122]. Por ejemplo, para un fluido simple bajo un gradiente térmico, su factor de estructura, que determina la intensidad de la dispersión de Rayleigh, diverge como k^{-4} para valores pequeños del número de onda k ; esta dependencia equivale a un decaimiento algebraico de la función de correlación densidad-densidad, una característica que se ha verificado experimentalmente [123], [124].

La hidrodinámica fluctuante se ha generalizado con éxito para describir las fluctuaciones en estados estacionarios de no equilibrados en fluidos simples que incluyen fuerzas externas tanto disipativas como conservativas [62]. Esto se logra suponiendo que las correlaciones de ruido satisfacen el equilibrio térmico local,

es decir, asumiendo que es válido el mismo teorema de fluctuación-disipación para los fluidos en el equilibrio termodinámico, pero con valores locales de la temperatura y la densidad. Sin embargo, esta generalización ha sido escasamente aplicada a fluidos complejos como cristales líquidos nemáticos sobre estados estacionarios de no equilibrio, aunque algunos ejemplos específicos han sido estudiados teóricamente. Por ejemplo, se ha investigado la naturaleza de sus modos para estos estados, como los generados por un gradiente uniforme de temperatura [56], un flujo de cizalla estacionario [57] o por un gradiente de presión constante impuesto externamente [70], [125], [126], [127]. Además, las fluctuaciones térmicas en fluidos complejos bajo estados estacionarios de no equilibrio se han estudiado en [35], [128]. En los dos primeros casos se encontró que las contribuciones de no equilibrio al espectro de dispersión de la luz correspondiente eran pequeñas, aunque en principio detectables, mientras que en el caso de un flujo de Poiseuille inducido por un gradiente de presión externo el efecto puede ser bastante grande. Por lo que conocemos, el estudio experimental de la dinámica de estas fluctuaciones es muy limitado, a pesar de que en los nemáticos la intensidad de la luz dispersada es varios órdenes de magnitud mayor que en los fluidos simples [87].

Dado que el conjunto de ecuaciones nematodinámicas fluctuantes (2.128)-(2.134) presenta la misma estructura señalada por la expresión (1.53), la transformada de Fourier de dichas ecuaciones, en ausencia de los ruidos, tendrá la forma general (1.55). Por consiguiente, es de esperarse que las fluctuaciones presenten un decaimiento infinitamente largo conforme $k \rightarrow 0$, es decir, se tendrá la existencia de modos hidrodinámicos nemáticos. De hecho, en la literatura [58] ya se ha reportado la existencia de siete modos hidrodinámicos para un cristal líquido en el estado de equilibrio termodinámico, siendo dos de naturaleza propagativa y cinco difusiva.

En este capítulo se calcularán estos modos hidrodinámicos para una capa nemática termótropa en un estado estacionario producido por la presencia de fuerzas externas tanto disipativas (gradiente uniforme de temperatura) como conservativas (campo gravitacional constante pequeño), utilizando el enfoque de la hidrodinámica fluctuante. La composición corresponde a la de una celda nemática en un sistema de Rayleigh-Bénard y su análisis se efectuará sólo para el régimen no-convectivo. Estudiaremos el comportamiento de las fluctuaciones en el cristal líquido nemático cuando sobre éste actúan estos gradientes cada uno por separado y también de forma conjunta, tomando como guía el análisis realizado en la literatura para un fluido simple bajo estas mismas circunstancias [62]. Desde un punto de vista teórico, es de gran importancia conocer cómo además de la presencia de un gradiente de temperatura uniforme externo, una fuerza tan pequeña como la gravedad también puede afectar las fluctuaciones en un cristal líquido. Resulta natural preguntarse también si el efecto de ambas fuerzas externas ocasionan modificaciones en los modos hidrodinámicos nemáticos y si éstas pueden llegar a ser significativas. Hasta donde sabemos, sus efectos sólo han sido explorados en las referencias [66] y [65] para el mismo estado estacionario de no equilibrio aquí considerado, pero utilizando diferentes descripciones teóricas basadas en la aproximación de Boussinesq de las ecuaciones hidrodinámicas y usando una teoría de fluctuaciones cuasiestacionaria. En la primera referencia la configuración inicial del cristal líquido nemático es homeótropa, en tanto que en la última es planar.

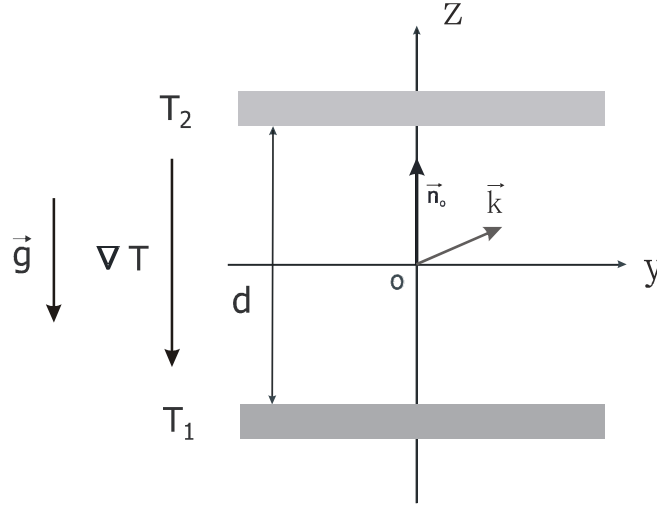


Figura 4.1: Representación esquemática de una celda de cristal líquido nemático homeótropa plana bajo la presencia de un campo gravitacional \vec{g} constante y un gradiente de temperatura externo ∇T uniforme producido por las diferentes temperaturas T_1 y T_2 ($T_1 > T_2$) en las placas. \vec{k} es el vector de dispersión.

4.2. Modelo

Consideremos una capa delgada de cristal líquido nemático de espesor d bajo la presencia de un campo gravitacional constante $\vec{g} = -g\hat{z}$, en dónde \hat{z} denota al vector unitario a lo largo del eje z . La configuración inicial de la capa nemática es homeótropa con una orientación preferencial \hat{n}_0 a lo largo del eje z , tal como se muestra en la Figura 4.1. El nemático está confinado entre dos placas planas paralelas mantenidas a las temperaturas fijas T_1 y T_2 ($T_1 > T_2$), lo cual da lugar a un gradiente de temperatura uniforme $\nabla_z T \equiv -\alpha\hat{z}$ entre ellas dirigido hacia abajo. También puede ser considerada la situación en la que el gradiente puede estar dirigido hacia arriba y en este caso $\nabla_z T \equiv \alpha\hat{z}$. La fuerza gravitacional induce un gradiente de presión, $\nabla_z p = -\rho g\hat{z}$, en donde ρ es la densidad de masa. Cabe señalar que el análisis de este sistema de Rayleigh-Bénard se efectuará sólo para el régimen no-convectivo.

4.2.1. Estado estacionario

La presencia del gradiente uniforme de temperatura $\nabla_z T$ debido a la diferencia de temperaturas de las placas y del gradiente de presión $\nabla_z p$ producido por la presencia del campo gravitatorio uniforme, ocasionan que la capa nemática se encuentre en un estado estacionario. Se supondrá que la diferencia de temperaturas entre las placas tan solo difiere de unos cuantos grados K , de manera que no se generen en la capa nemática flujos (por lo que $v_i^{st} = 0$) ni tampoco inestabilidades del tipo Rayleigh-Bénard. Seleccionaremos como variables nematodinámicas al conjunto $\psi = \{p, s, v_i, n_i\}$, en donde $s(\vec{r}, t)$ es la densidad de entropía específica (entropía por unidad de masa), $v_i(\vec{r}, t)$ la velocidad hidrodinámica y $n_i(\vec{r}, t)$ es el campo director. Es de esperarse que en este estado las variables nematodinámicas, así como todos los parámetros materiales

nemáticos involucrados, dependen tanto de la temperatura como de la presión.

Debido a la geometría del modelo, es de esperarse que en el estado estacionario estas cantidades se vean afectadas por la presencia de los gradientes externos indicados, y que los cambios ocurran sólo en la dirección z en la que los gradientes son aplicados. Una forma bastante general de describir en el estado estacionario a cualquiera de estas cantidades mencionada (que indicaremos por el superíndice st), digamos $\psi^{st} = \psi(p(z), T(z))$, consiste en un desarrollo en serie de Taylor de la misma alrededor de su estado de equilibrio y considerar sólo términos hasta primer orden en la forma

$$\psi^{st} = \psi_0(p_0, T_0) + \left(\frac{\partial \psi}{\partial T} \right)_{p=p_0} \frac{dT}{dz} z + \left(\frac{\partial \psi}{\partial p} \right)_{T=T_0} \frac{dp}{dz} z, \quad (4.1)$$

en donde $(\partial \psi / \partial T)_{p=p_0}$ y $(\partial \psi / \partial p)_{p=p_0}$ denotan las variaciones en el estado estacionario de la cantidad $\psi(p, T)$ respecto a la temperatura y la presión, respectivamente, evaluadas a una temperatura y presión promedios en el estado de equilibrio (denotado por el subíndice 0) en $z_0 = 0$; y dT/dz y dp/dz , indican los cambios de la temperatura y la presión (esto es, los gradientes) a lo largo del eje z .

Si se considera $T^{st} = T(z)$ y que la temperatura en las placas es $T_1 = T(z = -d/2)$ y $T_2 = T(z = d/2)$, de acuerdo con (4.1), se produce el perfil de temperatura estacionario

$$T^{st} = T(z) = T_0 + \frac{dT}{dz} z = T_0 \left(1 - \frac{\alpha}{T_0} z \right), \quad (4.2)$$

en donde $T_0 = T^{st}(z = 0) = (T_1 + T_2)/2$ y $\alpha \equiv \Delta T/d$, con $\Delta T \equiv T_1 - T_2$, siendo $T_1 > T_2$. En adelante únicamente se considerará que $T_0 \approx 3.0 \times 10^2 K$.

Considerando que en el caso más general $s^{st} = s(p(z), T(z))$ y $\rho^{st} = \rho(p(z), T(z))$, puede mostrarse partiendo de (4.1), que en este estado estacionario, se tienen las siguientes expresiones para la densidad específica de entropía

$$s^{st} = s_0 - \frac{c_p}{T_0} \left(\alpha - g \frac{\beta T_0}{c_p} \right) z \quad (4.3)$$

y para la densidad

$$\rho^{st} = \rho_0 \left[1 + \beta \left(\alpha - \frac{g \beta T_0}{c_p} \frac{\gamma}{\gamma - 1} \right) z \right], \quad (4.4)$$

en donde c_p es el calor específico a presión constante, β el coeficiente de expansión térmica y $\gamma \equiv c_p/c_v = c_s^2/c_T^2$, siendo en este último c_v el calor específico a volumen constante, así como c_s y c_T , respectivamente, las velocidades adiabática e isotérmica del sonido en el nemático. En la deducción de las expresiones (4.3) y (4.4) se han empleado las relaciones $(\partial s / \partial T)_{p_0} = c_p/T_0$, $(\partial s / \partial p)_{T_0} = -\beta/\rho_0$, $(\partial \rho / \partial T)_{p_0} = -\rho_0 \beta$, $(\partial \rho / \partial p)_{T_0} = c_T^{-2}$ y $\beta^2 \equiv (\gamma - 1) c_p/T_0 c_s^2$. En la discusión resulta conveniente introducir el *gradiente de temperatura efectivo* $\nabla_z T^{st} \equiv X \hat{z}$ como [62],

$$X \equiv -\alpha + \frac{g \beta T_0}{c_p}, \quad (4.5)$$

el cual contiene explícitamente las contribuciones de ambas fuerzas externas. De esta manera, en este estado estacionario

$$s^{st} = s_0 + \frac{c_p}{T_0} X z, \quad (4.6)$$

$$\rho^{st} = \rho_0 - \rho_0 \beta \left[X + \frac{g\beta T_0}{(\gamma - 1) c_p} \right] z, \quad (4.7)$$

$$\nabla_z s^{st} = \frac{c_p}{T_0} X \hat{z} \quad (4.8)$$

$$\nabla_z \rho^{st} = -\rho_0 \beta \left[X + \frac{g\beta T_0}{(\gamma - 1) c_p} \right] \hat{z}. \quad (4.9)$$

4.2.2. Ecuaciones nematodinámicas fluctuantes

En el Capítulo 1 se mostró que la evolución temporal de un fluido nemático queda determinada completamente sus ecuaciones de conservación para la densidad de masa

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + v_j \partial_j \right) \rho + \rho \partial_l v_l = 0, \quad (4.10)$$

así como de balance para la densidad de cantidad de movimiento

$$\rho \left(\frac{\partial}{\partial t} + v_j \nabla_j \right) v_i = -\nabla_i p - \nabla_j (\Phi_{jl} \partial_l n_l) - \frac{1}{2} \nabla_j (\lambda_{imj} h_m) + \nabla_j \sigma'_{ij} + \rho f_i, \quad (4.11)$$

la densidad específica de entropía

$$\rho T \left(\frac{\partial s}{\partial t} + v_i \nabla_i s \right) = \sigma'_{ij} \nabla_j v_i - \nabla_j q_j + \mathcal{N}_k h_k \quad (4.12)$$

y del director

$$\frac{\partial n_i}{\partial t} + v_j \partial_j n_i - \frac{1}{2} \lambda_{ijk} \partial_j v_k - \mathcal{N}_i = 0. \quad (4.13)$$

La ecuación (4.10) está dada por (1.161), la (4.11) se obtiene de sustituir (1.166) en (1.162), la (4.12) es (1.177), y (4.13) se encuentra al insertar (1.168) en (1.164). En el sistema de ecuaciones (4.10)-(4.13) se tienen como variables nematodinámicas a la densidad de masa $\rho(\vec{r}, t)$, la velocidad del flujo $v_i(\vec{r}, t)$, la temperatura $T(\vec{r}, t)$, la presión $p(\vec{r}, t)$, la entropía específica $s(\vec{r}, t)$ y director $n_i(\vec{r}, t)$; asimismo, en dicho sistema se encuentran cantidades disipativas tales como la corriente de cantidad de movimiento σ'_{ij} , el flujo de calor q_i y la cuasicorriente \mathcal{N}_i , las cuales están dadas, respectivamente, por las expresiones (1.175), (1.167) y (1.176).

Las ecuaciones de conservación y de balance (4.10)-(4.13) describen en cualquier instante todo movimiento del medio nemático, incluido el de los cambios que éste presenta debido a las desviaciones de sus variables en el estado estacionario definido con anterioridad. Así, en esta situación las variables $\rho(\vec{r}, t)$, $v_i(\vec{r}, t)$, $s(\vec{r}, t)$ y $n_i(\vec{r}, t)$ pueden ser interpretadas como la suma de sus valores ρ^{st} , v_i^{st} , s^{st} y n_i^{st} en el estado estacionario con sus correspondientes desviaciones $\delta\rho(\vec{r}, t)$, $\delta v_i(\vec{r}, t)$, $\delta s(\vec{r}, t)$ y $\delta n_i(\vec{r}, t)$ con respecto a sus valores en el estado estacionario. Así, resulta posible escribir a estas fluctuaciones como $\delta\rho(\vec{r}, t) = \rho(\vec{r}, t) - \rho^{st}$, $\delta v_i(\vec{r}, t) = v_i(\vec{r}, t) - v_i^{st}$, $\delta s(\vec{r}, t) = s(\vec{r}, t) - s^{st}$ y $\delta n_i(\vec{r}, t) = n_i(\vec{r}, t) - n_i^{st}$. Puede observarse que al escribir $\delta v_i(\vec{r}, t)$ se ha considerado $v_i^{st} = 0$, lo cual significa que en este estado estacionario no hay presencia de flujos. De manera similar, las desviaciones del tensor de esfuerzos $\sigma'_{ij}(\vec{r}, t)$, el flujo de calor $q_i(\vec{r}, t)$, la cuasicorriente $Y_i(\vec{r}, t)$ y el campo molecular $h_k(\vec{r}, t)$, pueden escribirse en la forma

$\delta\sigma'_{ij}(\vec{r}, t) = \sigma'_{ij}(\vec{r}, t) - \sigma'^{st}_{ij}$, $\delta q_i(\vec{r}, t) = q_i(\vec{r}, t) - q_i^{st}$, $\delta Y_i(\vec{r}, t) = Y_i(\vec{r}, t) - Y_i^{st}$ y $\delta h_i(\vec{r}, t) = h_i(\vec{r}, t) - h_i^{st}$, respectivamente.

Si se escriben las ecuaciones (4.10)-(4.13), hasta primer orden, en términos de las desviaciones señaladas con anterioridad y si se toma en consideración que para este estado estacionario (caracterizado por $v_i^{st} = 0$ y $n_i^{st} = cte.$) $h_i^{st} = 0$ y $\Phi_{lj}^{st} = 0$, entonces se obtiene el conjunto de ecuaciones

$$\frac{\partial}{\partial t}\delta\rho = -\delta v_j \nabla_j \rho^{st} - \rho^{st} \nabla_l \delta v_l, \quad (4.14)$$

$$\rho^{st} \frac{\partial}{\partial t} \delta v_i = -\nabla_i \delta p - \frac{1}{2} \lambda_{kji}^{st} \nabla_j \delta h_k + \nabla_j \delta \sigma'_{ij} - g \delta_{iz} \delta \rho, \quad (4.15)$$

$$\rho^{st} T^{st} \left(\frac{\partial}{\partial t} \delta s + \delta v_j \nabla_j s^{st} \right) = -\nabla_l \delta q_l, \quad (4.16)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \delta n_i = \frac{1}{2} \lambda_{ijk}^{st} \partial_j \delta v_k + \delta \mathcal{N}_i. \quad (4.17)$$

En las ecuaciones (4.14)-(4.17) las desviaciones del tensor de esfuerzos $\delta\sigma'_{ij}$, el flujo de calor δq_l y la cuasi-corriente $\delta\mathcal{N}_i$, de acuerdo con las expresiones (1.175), (1.167) y (1.176), respectivamente, son

$$\delta\sigma'_{ij} \equiv \nu_{ijkl}^{st} \nabla_l \delta v_k. \quad (4.18)$$

$$\delta q_l \equiv -\delta\kappa_{lj} \nabla_j T^{st} - \kappa_{lj}^{st} \nabla_j \delta T, \quad (4.19)$$

$$\delta\mathcal{N}_i \equiv \frac{1}{\gamma_1} \left(\delta_{ik}^\perp \right)^{st} \delta h_k; \quad (4.20)$$

en donde δh_i y $\delta\kappa_{ij}$, según (1.169) y (1.171), están dadas como

$$\delta h_i = \left(\delta_{ir}^\perp \right)^{st} K_{rjkl}^{st} \partial_j \partial_l \delta n_k, \quad (4.21)$$

$$\delta\kappa_{ij} = \kappa_a (n_i \delta n_j + \delta n_i n_j). \quad (4.22)$$

Para este estado estacionario, se ha considerado que las cantidades (1.172), (1.174), (1.170) y (1.171), respectivamente, toman la forma

$$K_{ijkl}^{st} = K_1 \delta_{ij} \delta_{kl} + K_2 n_p^{st} \epsilon_{pij} n_q^{st} \epsilon_{qkl} + K_3 n_j^{st} n_l^{st} \delta_{ik}, \quad (4.23)$$

$$\lambda_{kji}^{st} \equiv (\lambda - 1) \left(\delta_{kj}^\perp \right)^{st} n_i^{st} + (\lambda + 1) \left(\delta_{ki}^\perp \right)^{st} n_j^{st}, \quad (4.24)$$

$$\begin{aligned} \nu_{ijkl}^{st} \equiv & \nu_2 (\delta_{jl} \delta_{ik} + \delta_{il} \delta_{jk}) + 2(\nu_1 + \nu_2 - 2\nu_3) n_i^{st} n_j^{st} n_k^{st} n_l^{st} + (\nu_3 - \nu_2) (n_j^{st} n_l^{st} \delta_{ik} + n_j^{st} n_k^{st} \delta_{il} \\ & + n_i^{st} n_k^{st} \delta_{jl} + n_i^{st} n_l^{st} \delta_{jk}) + (\nu_4 - \nu_2) \delta_{ij} \delta_{kl} + (\nu_5 - \nu_4 + \nu_2) (\delta_{ij} n_k^{st} n_l^{st} + \delta_{kl} n_i^{st} n_j^{st}), \end{aligned} \quad (4.25)$$

$$\kappa_{ij}^{st} = \kappa_\perp \delta_{ij} + \kappa_a n_i^{st} n_j^{st}, \quad (4.26)$$

siendo $\left(\delta_{ir}^\perp \right)^{st} = \delta_{ir} - n_i^{st} n_r^{st}$.

Las ecuaciones (4.14)-(4.17) constituyen un conjunto de ecuaciones lineales para las desviaciones de las variables nematodinámicas mencionadas. Cabe señalar que, en la deducción de (4.15), se ha escrito a la fuerza por unidad de masa como $f_i = -\delta_{iz} g$, puesto que $\vec{g} = -g\hat{z}$. Por simplicidad, en (4.23)-(4.26) se

supondrá que los nueve coeficientes cinéticos $\nu_1, \nu_2, \nu_3, \nu_4, \nu_5, \kappa_{\perp}, \kappa_{\parallel}, \gamma_1$ y λ , además de los tres estáticos o elásticos K_1, K_2 y K_3 , en el estado estacionario presentan los mismos valores que en equilibrio.

En el Capítulo 2 se dedujeron para un fluido nemático, en el estado de equilibrio termodinámico, las relaciones de fluctuación-disipación (2.117), (2.118) y (2.119). Estas expresiones vinculan a las componentes fluctuantes $\Sigma_{\alpha j}(\vec{r}, t)$ de la corriente de cantidad de movimiento $\sigma'_{ij}(\vec{r}, t)$, $\pi_i(\vec{r}, t)$ del flujo de calor q_l y $\Upsilon_{\mu}(\vec{r}, t)$ de la cuasicorriente \mathcal{N}_i de la orientación del nemático, respectivamente, con sus propiedades de transporte $\nu_{\alpha\beta j l}^0, \kappa_{ij}^0$ y $\frac{1}{\gamma_1}\delta_{\mu\nu}^{\perp}$. Sin embargo, en la descripción de las fluctuaciones de las variables de estado del fluido nemático en el estado estacionario señalado, tomando en consideración las relaciones (2.135)-(2.137), supondremos que las desviaciones (4.18)-(4.20) pueden escribirse como

$$\delta\sigma'_{ij} \equiv \nu_{ijlm}^{st} \partial_m \delta v_l + \Sigma_{ij}, \quad (4.27)$$

$$\delta q_l \equiv -\delta\kappa_{lj} \nabla_j T^{st} - \kappa_{lj}^{st} \nabla_j \delta T + \pi_l, \quad (4.28)$$

$$\delta\mathcal{N}_i \equiv \frac{1}{\gamma_1} \left(\delta_{ik}^{\perp} \right)^{st} \delta h_k + \Upsilon_i. \quad (4.29)$$

Se supondrá que los términos de ruido Σ_{ij}, π_i y Υ_i siguen siendo de promedio cero

$$\langle \Sigma_{ij}(\vec{r}, t) \rangle = \langle \pi_i(\vec{r}, t) \rangle = \langle \Upsilon_i(\vec{r}, t) \rangle = 0, \quad (4.30)$$

que sus correlaciones cruzadas son nulas y que satisfacen las mismas relaciones de fluctuación-disipación (2.117)-(2.119) halladas para el estado de equilibrio, pero reemplazando la temperatura de equilibrio por T^{st} dada por la ecuación (4.2). Consecuentemente, es de esperarse que dichas relaciones de fluctuación-disipación para el estado estacionario sean [3], [71],

$$\langle \Sigma_{\alpha j}(\vec{r}, t) \Sigma_{\beta l}(\vec{r}', t') \rangle = 2k_B T^{st} \nu_{\alpha\beta j l}^{st} \delta(\vec{r} - \vec{r}') \delta(t - t'), \quad (4.31)$$

$$\langle \pi_i(\vec{r}, t) \pi_j(\vec{r}', t') \rangle = 2k_B (T^{st})^2 \kappa_{ij}^{st} \delta(\vec{r} - \vec{r}') \delta(t - t'), \quad (4.32)$$

$$\langle \Upsilon_{\mu}(\vec{r}, t) \Upsilon_{\nu}(\vec{r}', t') \rangle = 2k_B T^{st} \frac{1}{\gamma_1} \left(\delta_{\mu\nu}^{\perp} \right)^{st} \delta(\vec{r} - \vec{r}') \delta(t - t'). \quad (4.33)$$

La sustitución de los gradientes externo $\nabla_z T$ y $\nabla_z p$, del perfil (4.2), así como las expresiones (4.6) a (4.9) y (4.27) a (4.29) en las ecuaciones (4.14)-(4.17), da lugar, manteniendo sólo las potencias de α y g de orden uno, al siguiente conjunto de ecuaciones nematodinámicas fluctuantes lineales

$$\frac{\partial}{\partial t} \delta\rho = \rho_0 \beta \left[X + \frac{g\beta T_0}{(\gamma-1)c_p} \right] \delta v_z - \rho_0 \left\{ 1 - \beta \left[X + \frac{g\beta T_0}{(\gamma-1)c_p} \right] z \right\} \nabla_l \delta v_l, \quad (4.34)$$

$$\begin{aligned} \rho_0 \left\{ 1 - \beta \left[X + \frac{g\beta T_0}{(\gamma-1)c_p} \right] z \right\} \frac{\partial}{\partial t} \delta v_i &= -\nabla_i \delta p - \frac{1}{2} \lambda_{kji}^{st} \nabla_j \delta h_k \\ &+ \nu_{ijlm}^{st} \nabla_j \partial_m \delta v_l - g\delta_{iz} \delta\rho + \nabla_j \Sigma_{ij}, \end{aligned} \quad (4.35)$$

$$\begin{aligned} \rho_0 T_0 \left\{ 1 - \beta \left[X + \frac{g\beta T_0}{(\gamma-1)c_p} \right] z \right\} \left(1 - \frac{\alpha}{T_0} z \right) \left(\frac{\partial}{\partial t} \delta s + \frac{c_p}{T_0} X \delta v_z \right) &= \\ -\alpha \nabla_l \delta\kappa_{lz} + \kappa_{ij}^{st} \nabla_l \nabla_j \delta T - \nabla_l \pi_l, \end{aligned} \quad (4.36)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \delta n_i = \frac{1}{2} \lambda_{ijk}^{st} \partial_j \delta v_k + \frac{1}{\gamma_1} \left(\delta_{ik}^\perp \right)^{st} \delta h_k + \Upsilon_i. \quad (4.37)$$

Estas ecuaciones pueden simplificarse considerablemente al considerar, por una parte, que para nemáticos termótopos, $\rho_0 \simeq 1g/cm^3$, $T_0 \simeq 3.0 \times 10^2 K$, $\beta \sim 10^{-4} K^{-1}$, $c_T \sim 10^5 cm/s$, $c_p \sim 10^7 cm^2 K^{-1} s^{-2}$ [46]. Por otra parte, en experimentos típicos de dispersión de luz, para el gradiente de temperatura α y la distancia z , se cumple $\alpha \lesssim 10^2 K/cm$ y $z \lesssim 10^{-1} cm$, y además para la aceleración de la gravedad $g \simeq 980 cm/s^2$ ($\sim 10^3 cm/s^2$). De esta manera, $\beta X z \lesssim 10^{-3}$, $\alpha z/T_0 \lesssim 10^{-1}$, $g\beta^2 T_0 z / [(\gamma - 1) c_p] = gz/c_T^2 \sim 10^{-8}$; consecuentemente, en las ecuaciones (4.34)-(4.37) los términos $\beta X z \lesssim 10^{-3}$, $gz/c_T^2 \sim 10^{-8}$ y $\alpha z/T_0 \lesssim 10^{-1}$ pueden ignorarse. Así, el sistema (4.34)-(4.37) da lugar a un conjunto más compacto de ecuaciones nematodinámicas fluctuantes

$$\frac{\partial}{\partial t} \delta \rho = \rho_0 \beta \left[X + \frac{g\beta T_0}{(\gamma - 1) c_p} \right] \delta v_z - \rho_0 \nabla_l \delta v_l, \quad (4.38)$$

$$\rho_0 \frac{\partial}{\partial t} \delta v_i = -\nabla_i \delta p - \frac{1}{2} \lambda_{kji}^{st} \nabla_j \delta h_k + \nu_{ijlm}^{st} \nabla_j \partial_m \delta v_l - g \delta_{iz} \delta \rho + \nabla_j \Sigma_{ij}, \quad (4.39)$$

$$\rho_0 T_0 \frac{\partial}{\partial t} \delta s = -\rho_0 c_p X \delta v_z - \alpha \nabla_l \delta \kappa_{lz} + \kappa_{ij}^{st} \nabla_l \nabla_j \delta T - \nabla_l \pi_l, \quad (4.40)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \delta n_i = \frac{1}{2} \lambda_{ijk}^{st} \partial_j \delta v_k + \frac{1}{\gamma_1} \left(\delta_{ik}^\perp \right)^{st} \delta h_k + \Upsilon_i. \quad (4.41)$$

Es importante enfatizar algunas características relevantes de estas ecuaciones. En primer lugar, si el nemático es incompresible, $\nabla_j \delta v_j = 0$, las fluctuaciones de la densidad no se eliminan debido el gradiente de temperatura α y el campo gravitatorio g . En segundo lugar, son consistentes con los resultados conocidos en la literatura, pues si se toma el límite isótropo de las ecuaciones (4.38)-(4.40), se reemplaza X por $-\alpha$ y se elimina el término $g\rho_0\beta^2 T_0 \delta v_z / [(\gamma - 1) c_p] = \rho_0 g \delta v_z / c_T^2$, se obtienen las correspondientes ecuaciones hidrodinámicas (no estocásticas) para un fluido simple en un sistema de Rayleigh-Bénard, dadas por las ecuaciones (2) en la referencia [63].

4.2.3. Cambio al conjunto de variables δp y δs

Puesto que uno de los propósitos del presente trabajo de investigación consiste en calcular el espectro de dispersión de luz de un nemático, resulta conveniente cambiar a otro conjunto de variables fluctuantes termodinámicas. En dispersión de luz puede considerarse que las fluctuaciones de la densidad del medio que dispersan al haz incidente, pueden ser separadas en dos tipos: aquellas que son de origen mecánico, y las que provienen de un proceso térmico. Esta separación se produce de manera natural en la teoría termodinámica de fluctuaciones, dado que las fluctuaciones de la densidad $\delta \rho$ pueden ser descritas en términos de las fluctuaciones de la presión y de la entropía $\delta \rho(\delta p, \delta s)$ o de la presión y de la temperatura $\delta \rho(\delta p, \delta T)$ [10]. Brillouin ha sugerido que en un fluido, la luz se dispersa por ondas sonoras térmicas [15]. Este tipo de ondas son análogas a las de Debye en un cristal. Dado que la propagación del sonido es prácticamente un proceso adiabático, las fluctuaciones en la densidad podrían descomponerse en fluctuaciones de la presión a entropía

constante y en fluctuaciones de la entropía a presión constante. Este tipo de descomposición es discutida en detalle por Frenkel [129].

De esta manera, se optará por representar al conjunto de ecuaciones (4.38)-(4.41) en términos de las variaciones del campo de presiones δp y de la entropía por unidad de masa δs , en vez de los cambios en la densidades $\delta\rho$ y la temperatura δT . Esto resulta posible si se supone que en el estado estacionario son válidas las relaciones termodinámicas

$$\delta\rho = \left(\frac{\partial\rho}{\partial p}\right)_s^{st} \delta p + \left(\frac{\partial\rho}{\partial s}\right)_p^{st} \delta s, \quad (4.42)$$

$$\delta T = \left(\frac{\partial T}{\partial p}\right)_s^{st} \delta p + \left(\frac{\partial T}{\partial s}\right)_p^{st} \delta s, \quad (4.43)$$

en las que $(\partial\rho/\partial p)_s^{st} \equiv 1/c_s^2$, $(\partial\rho/\partial s)_p^{st} \equiv -\beta^{st}\rho^{st}T^{st}/c_p = -\beta\rho_0 T_0/c_p$, $(\partial T/\partial p)_s^{st} \equiv \beta^{st}T^{st}/(\rho^{st}c_p) = \beta T_0/(\rho_0 c_p)$, $(\partial T/\partial s)_p^{st} \equiv T^{st}/c_p = T_0/c_p$, siendo $\beta^{st} \equiv -1/\rho^{st}(\partial\rho/\partial T)_p^{st} = -1/\rho_0(\partial\rho/\partial T)_p$ y $\chi_i^{st} \equiv \kappa_i/\rho^{st}c_p = \kappa_i/(\rho_0 c_p)$ (para $i = \perp, \parallel$ y $\kappa_a = \kappa_{\parallel} - \kappa_{\perp}$), el coeficiente de difusividad térmica. Al escribir las relaciones (4.42)-(4.43), dado que $\beta Xz \lesssim 10^{-3}$, $\alpha z/T_0 \lesssim 10^{-1}$ y $gz/c_T^2 \sim 10^{-8}$, se asumirá que $\rho^{st} \simeq \rho_0$, $T^{st} \simeq T_0$ y que en el estado estacionario las cantidades termodinámicas β , c_p , c_T , c_s , κ_i , tienen los mismos valores que en el estado de equilibrio. Con la finalidad de simplificar la notación, se elegirá omitir en estos parámetros materiales cualquier subíndice o superíndice.

Por otra parte, dado que n_i está normalizada, esto es, $n_i^2 = 1$, se tiene $n_i dn_i = 0$; adicionalmente, como $\hat{n}^{st} = \hat{z}$ ocurre que $\delta n_z = 0$ pues $n_z^{st} = 1$ y, en general, $\delta n_\alpha \neq 0$ ya que $n_\alpha^{st} = 0$ para $\alpha = x, y$. Bajo estas consideraciones, el conjunto completo de ecuaciones hidrodinámicas fluctuantes linealizadas (4.38)-(4.41) escritas en términos de las variables $\{\delta p, \delta s, \delta v_i, \delta n_i\}$ está dado por

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \delta p &= \rho_0 g \delta v_z + (\gamma - 1) \left[\chi_{\perp} (\nabla_x^2 + \nabla_y^2) + \chi_{\parallel} \nabla_z^2 \right] \delta p + \frac{\rho_0}{\beta} (\gamma - 1) \left[\chi_{\perp} (\nabla_x^2 + \nabla_y^2) \right. \\ &\quad \left. + \chi_{\parallel} \nabla_z^2 \right] \delta s - \rho_0 c_s^2 \nabla_i \delta v_i - \alpha \beta \rho_0 \chi_a c_s^2 (\nabla_x \delta n_x + \nabla_y \delta n_y) - \frac{\gamma - 1}{\beta T_0} \nabla_j \pi_j, \end{aligned} \quad (4.44)$$

$$\begin{aligned} \rho_0 \frac{\partial}{\partial t} \delta v_x &= -\nabla_x \delta p + [(\nu_2 + \nu_4) \nabla_x^2 + \nu_2 \nabla_y^2 + \nu_3 \nabla_z^2] \delta v_x + \nu_4 \nabla_x \nabla_y \delta v_y \\ &\quad + (\nu_3 + \nu_5) \nabla_z \nabla_x \delta v_z - \frac{1}{2} (\lambda + 1) (K_1 \nabla_x^2 + K_2 \nabla_y^2 + K_3 \nabla_z^2) \nabla_z \delta n_x \\ &\quad - \frac{1}{2} (\lambda + 1) (K_1 - K_2) \nabla_z \nabla_x \nabla_y \delta n_y + \nabla_j \Sigma_{xj}, \end{aligned} \quad (4.45)$$

$$\begin{aligned} \rho_0 \frac{\partial}{\partial t} \delta v_y &= -\nabla_y \delta p + \nu_4 \nabla_y \nabla_x \delta v_x + [\nu_2 \nabla_x^2 + (\nu_2 + \nu_4) \nabla_y^2 + \nu_3 \nabla_z^2] \delta v_y \\ &\quad + (\nu_3 + \nu_5) \nabla_z \nabla_y \delta v_z - \frac{1}{2} (\lambda + 1) (K_1 - K_2) \nabla_z \nabla_x \nabla_y \delta n_x \\ &\quad - \frac{1}{2} (\lambda + 1) (K_2 \nabla_x^2 + K_1 \nabla_y^2 + K_3 \nabla_z^2) \nabla_z \delta n_y + \nabla_j \Sigma_{yj}, \end{aligned} \quad (4.46)$$

$$\begin{aligned}
\rho_0 \frac{\partial}{\partial t} \delta v_z &= -\nabla_z \delta p - \frac{g}{c_s^2} \delta p + (\nu_3 + \nu_5) \nabla_z \nabla_x \delta v_x + (\nu_3 + \nu_5) \nabla_z \nabla_y \delta v_y + [\nu_3 (\nabla_x^2 + \nabla_y^2) \\
&+ (2\nu_1 + \nu_2 - \nu_4 + 2\nu_5) \nabla_z^2] \delta v_z - \frac{1}{2} (\lambda - 1) [K_1 (\nabla_x^2 + \nabla_y^2) + K_3 \nabla_z^2] \nabla_x \delta n_x \\
&- \frac{1}{2} (\lambda - 1) [K_1 (\nabla_x^2 + \nabla_y^2) + K_3 \nabla_z^2] \nabla_y \delta n_y + g \frac{\beta \rho_0 T_0}{c_p} \delta s + \nabla_j \Sigma_{zj}, \tag{4.47}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial t} \delta s &= -\frac{c_p}{T_0} X \delta v_z + \frac{\beta}{\rho_0} [\chi_\perp (\nabla_x^2 + \nabla_y^2) + \chi_\parallel \nabla_z^2] \delta p + [\chi_\perp (\nabla_x^2 + \nabla_y^2) \\
&+ \chi_\parallel \nabla_z^2] \delta s - \alpha \frac{\chi_\alpha c_p}{T_0} (\nabla_x \delta n_x + \nabla_y \delta n_y) - \frac{1}{\rho_0 T_0} \nabla_j \pi_j, \tag{4.48}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial t} \delta n_x &= \frac{1}{2} (\lambda - 1) \nabla_x \delta v_z + \frac{1}{2} (\lambda + 1) \nabla_z \delta v_x + \frac{1}{\gamma_1} (K_1 - K_2) \nabla_x \nabla_y \delta n_y \\
&+ \frac{1}{\gamma_1} (K_1 \nabla_x^2 + K_2 \nabla_y^2 + K_3 \nabla_z^2) \delta n_x + \Upsilon_x, \tag{4.49}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial t} \delta n_y &= \frac{1}{2} (\lambda + 1) \nabla_z \delta v_y + \frac{1}{2} (\lambda - 1) \nabla_y \delta v_z + \frac{1}{\gamma_1} (K_1 - K_2) \nabla_x \nabla_y \delta n_x \\
&+ \frac{1}{\gamma_1} (K_2 \nabla_x^2 + K_1 \nabla_y^2 + K_3 \nabla_z^2) \delta n_y + \Upsilon_y, \tag{4.50}
\end{aligned}$$

con $j = x, y, z$. En las ecuaciones nematodinámicas lineales fluctuantes (4.44)-(4.50) aparecen términos que surgen sólo por la presencia del gradiente de temperatura α o del campo gravitatorio g , o por la influencia de ambos a la vez, como ocurre únicamente en el término $-(c_p X/T_0) \delta v_z$ de (4.48); en este caso, tanto α como g se acoplan con las desviaciones δv_z mediante el gradiente de temperatura generalizado X . Por último, es importante señalar que si el sistema (4.44)-(4.50) se reescribe en términos de las variables $(\delta\rho, \delta T)$ y en éste se hace $\alpha = 0$ y $g = 0$, se recupera el conjunto de ecuaciones (2.128)-(2.134) que describe el comportamiento de las fluctuaciones del nemático en el estado de equilibrio y que se deduce en la Subsección 2.3.3.

4.2.4. Cambio de representación de las variables hidrodinámicas fluctuantes

Con la finalidad de facilitar posteriormente el cálculo de los modos hidrodinámicos, así como el de las funciones de correlación de las variables involucradas, tomaremos en consideración el rompimiento de simetría inducido en el nemático por el campo director n_i . Éste ocasiona a su vez una anisotropía en el campo de velocidades v_i de su flujo, debido esencialmente al acoplamiento que presentan entre sí ambos campos. El cálculo de los modos hidrodinámicos de un nemático se facilita notablemente si se toma en cuenta la anisotropía que presenta dicho campo de velocidades. Para ello se requiere hacer un cambio del conjunto de variables hidrodinámicas fluctuantes $\{\delta p, \delta s, \delta v_x, \delta v_y, \delta v_z, \delta n_x, \delta n_y\}$ con el cual se describió la dinámica de las fluctuaciones del nemático en la subsección anterior, a otro conjunto nuevo en el que precisamente se tome en cuenta la anisotropía mencionada.

Cabe mencionar que al realizar el cambio al nuevo conjunto de variables termodinámicas fluctuantes, se ha optado por seleccionar a la entropía por unidad de masa s en vez de la volumétrica σ , porque se pretende

hacer en la descripción del nemático, un paralelismo con la metodología propuesta por Lekkerkerker y Boon [63] para un fluido simple. Precisamente un ejemplo de cómo puede tomarse en cuenta la anisotropía de un fluido en el conjunto de variables hidrodinámicas fluctuantes, lo mostraron Lekkerkerker y Boon, quienes propusieron un nuevo conjunto de variables para describir la dinámica de las fluctuaciones en un fluido simple, que experimenta un rompimiento de simetría a lo largo del eje z en el actúan paralela o antiparalelamente tanto un gradiente externo de temperatura como un campo gravitatorio. En un cristal líquido nemático se tiene una situación similar, ya que si la orientación inicial del director \hat{n}_i^0 se toma a lo largo del eje coordenado z , el nemático al igual que el fluido simple señalado, exhibirá también invariancias rotacional alrededor de dicho eje, bajo inversiones respecto al plano xy y ante reflexiones respecto a planos que contengan al eje z . De esta manera, siguiendo a Lekkerkerker y Boon, resulta natural reescribir el campo de velocidades del nemático en las componentes [130]

$$\delta\varphi \equiv \nabla \cdot \delta\vec{v} = \nabla_x \delta v_x + \nabla_y \delta v_y + \nabla_z \delta v_z, \quad (4.51)$$

$$\delta\psi \equiv (\nabla \times \delta\vec{v})_z = \nabla_x \delta v_y - \nabla_y \delta v_x, \quad (4.52)$$

$$\delta\xi \equiv (\nabla \times \nabla \times \delta\vec{v})_z = \frac{\partial \delta\varphi}{\partial z} - \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) \delta v_z. \quad (4.53)$$

Por analogía, al aplicar los mismos criterios de simetría al campo director \vec{n} , resulta conveniente reescribir a sus desviaciones $\delta\vec{n}$ en términos de las componentes [131]

$$\delta f_1 \equiv \nabla \cdot \delta\vec{n} = \nabla_x \delta n_x + \nabla_y \delta n_y, \quad (4.54)$$

$$\delta f_2 \equiv (\nabla \times \delta\vec{n})_z = \nabla_x \delta n_y - \nabla_y \delta n_x. \quad (4.55)$$

En esta nueva representación, el conjunto completo de ecuaciones hidrodinámicas estocásticas para las fluctuaciones (4.44)-(4.50), escrito en términos de las variables $\{\delta\varphi, \delta\psi, \delta\xi, \delta f_1, \delta f_2, \delta s, \delta p\}$, toma la foma

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \delta p &= (\gamma - 1)(\chi_\perp \nabla_\perp^2 + \chi_\parallel \nabla_\parallel^2) \delta p + \frac{\rho_0}{\beta} (\gamma - 1)(\chi_\perp \nabla_\perp^2 + \chi_\parallel \nabla_\parallel^2) \delta s \\ &+ g \rho_0 \delta v_z - \rho_0 c_s^2 \delta\varphi - \alpha \beta \rho_0 \chi_a c_s^2 \delta f_1 - \frac{\gamma - 1}{\beta T_0} \nabla_l \pi_l, \end{aligned} \quad (4.56)$$

$$\begin{aligned} \rho_0 \frac{\partial}{\partial t} \delta\varphi &= [(2\nu_3 - \nu_2 - \nu_4 + \nu_5) \nabla_\perp^2 + (2\nu_1 + \nu_2 - 2\nu_3 - \nu_4 + \nu_5) \nabla_\parallel^2] \nabla_z \delta v_z \\ &- \left(\nabla^2 + \frac{g}{c_s^2} \nabla_z \right) \delta p + g \frac{\beta \rho_0 T_0}{c_p} \nabla_z \delta s + [(\nu_2 + \nu_4) \nabla_\perp^2 + (2\nu_3 + \nu_5) \nabla_\parallel^2] \delta\varphi \\ &- \lambda (K_1 \nabla_\perp^2 + K_3 \nabla_\parallel^2) \nabla_z \delta f_1 + \nabla_l (\nabla_x \Sigma_{xl} + \nabla_y \Sigma_{yl} + \nabla_z \Sigma_{zl}), \end{aligned} \quad (4.57)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \delta s &= \frac{\beta}{\rho_0} (\chi_\perp \nabla_\perp^2 + \chi_\parallel \nabla_\parallel^2) \delta p + (\chi_\perp \nabla_\perp^2 + \chi_\parallel \nabla_\parallel^2) \delta s \\ &- \frac{c_p}{T_0} X \delta v_z - \alpha \frac{\chi_a c_p}{T_0} \delta f_1 - \frac{1}{\rho_0 T_0} \nabla_l \pi_l, \end{aligned} \quad (4.58)$$

$$\begin{aligned} \rho_0 \frac{\partial}{\partial t} \delta \xi = & \left[(\nu_2 - \nu_3 + \nu_4 - \nu_5) \nabla_{\perp}^2 + \nu_3 \nabla_{\parallel}^2 \right] \nabla_z \delta \varphi - [\nu_3 (\nabla_{\perp}^2 - \nabla_{\parallel}^2)^2 + 2(\nu_1 + \nu_2) \nabla_{\perp}^2 \nabla_{\parallel}^2] \delta v_z \\ & + \frac{1}{2} [(\lambda - 1) \nabla_{\perp}^2 - (\lambda + 1) \nabla_{\parallel}^2] (K_1 \nabla_{\perp}^2 + K_3 \nabla_{\parallel}^2) \delta f_1 + \frac{g}{c_s^2} \nabla_{\perp}^2 \delta p - g \frac{\beta \rho_0 T_0}{c_p} \nabla_{\perp}^2 \delta s \\ & + \nabla_z \nabla_l (\nabla_x \Sigma_{xl} + \nabla_y \Sigma_{yl} + \nabla_z \Sigma_{zl}) - \nabla^2 \nabla_l \Sigma_{zl}, \end{aligned} \quad (4.59)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \delta f_1 = & \frac{1}{2} [(\lambda - 1) \nabla_{\perp}^2 - (\lambda + 1) \nabla_z^2] \delta v_z + \frac{1}{\gamma_1} (K_1 \nabla_{\perp}^2 + K_3 \nabla_{\parallel}^2) \delta f_1 \\ & + \frac{1}{2} (\lambda + 1) \nabla_z \delta \varphi + \nabla_x \Upsilon_x + \nabla_y \Upsilon_y, \end{aligned} \quad (4.60)$$

$$\rho_0 \frac{\partial}{\partial t} \delta \psi = (\nu_2 \nabla_{\perp}^2 + \nu_3 \nabla_{\parallel}^2) \delta \psi - \frac{1}{2} (\lambda + 1) (K_2 \nabla_{\perp}^2 + K_3 \nabla_{\parallel}^2) \nabla_z \delta f_2 + \nabla_l (\nabla_x \Sigma_{yl} - \nabla_y \Sigma_{xl}), \quad (4.61)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \delta f_2 = \frac{1}{2} (\lambda + 1) \nabla_z \delta \psi + \frac{1}{\gamma_1} (K_2 \nabla_{\perp}^2 + K_3 \nabla_{\parallel}^2) \delta f_2 + \nabla_x \Upsilon_y - \nabla_y \Upsilon_x, \quad (4.62)$$

en donde $l = x, y, z$ y $\nabla^2 \equiv \nabla_{\perp}^2 + \nabla_{\parallel}^2$ con $\nabla_{\perp}^2 \equiv \nabla_x^2 + \nabla_y^2$, $\nabla_{\parallel}^2 \equiv \nabla_z^2$. En el sistema de ecuaciones (4.56)-(4.62), δv_z se acopla con $\delta \xi$ y $\delta \varphi$ a través de la relación $\delta \xi \equiv \nabla_z \delta \varphi - \nabla^2 \delta v_z$.

Si se define la transformada de Fourier de un campo arbitrario $\mathcal{H}(\vec{r}, t)$ como

$$\tilde{\mathcal{H}}(\vec{k}, \omega) \equiv \frac{1}{(2\pi)^4} \int_{-\infty}^{\infty} \mathcal{H}(\vec{r}, t) \exp[-i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t)] d\vec{r} dt, \quad (4.63)$$

con

$$\mathcal{H}(\vec{r}, t) = \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{\mathcal{H}}(\vec{k}, \omega) \exp[i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t)] d\vec{k} d\omega, \quad (4.64)$$

y se toma la transformada respecto a \vec{r} , el conjunto de ecuaciones (4.56)-(4.62) se reescribe en forma matricial

$$\frac{\partial}{\partial t} \delta \vec{X}(\vec{k}, t) = -M \delta \vec{X}(\vec{k}, t) + \vec{\Theta}(\vec{k}, t), \quad (4.65)$$

en donde

$$\delta \vec{X}(\vec{k}, t) = \left(\delta \vec{X}^L, \delta \vec{X}^T \right)^{\dagger} \quad (4.66)$$

y

$$\delta \vec{X}^L(\vec{k}, t) = \left(\delta \tilde{p}, \delta \tilde{\varphi}, \delta \tilde{s}, \delta \tilde{\xi}, \delta \tilde{f}_1 \right)^{\dagger}, \quad (4.67)$$

$$\delta \vec{X}^T(\vec{k}, t) = \left(\delta \tilde{\psi}, \delta \tilde{f}_2 \right)^{\dagger}. \quad (4.68)$$

El superíndice \dagger denota la transpuesta. La matriz hidrodinámica M es diagonal por bloques

$$M = \left(\begin{array}{c|c} M^L & 0 \\ \hline 0 & M^T \end{array} \right), \quad (4.69)$$

en donde los superíndices L y T denotan, respectivamente, al conjunto de variables longitudinal y transversal.

La forma explícita de las submatrices M^L , M^T , es

$$M^L = \left(\begin{array}{cccccc} (\gamma - 1) D_T k^2 & \rho_0 c_s^2 + g \frac{\rho_0 i k_z}{k^2} & \frac{\rho_0}{\beta} (\gamma - 1) D_T k^2 & -g \frac{\rho_0}{k^2} & \alpha \beta \rho_0 \chi_a c_s^2 \\ -\frac{k^2}{\rho_0} + g \frac{i k_z}{\rho_0 c_s^2} & \sigma_1 k^2 & -g \frac{\beta T_0}{c_p} i k_z & \sigma_2 i k_z & -\frac{\lambda K_L}{\rho_0} i k^2 k_z \\ \frac{\beta}{\rho_0} D_T k^2 & -X \frac{c_p i k_z}{T_0 k^2} & D_T k^2 & X \frac{c_p}{T_0 k^2} & \alpha \frac{\chi_a c_p}{T_0} \\ g \frac{k_z^2}{\rho_0 c_s^2} & -\sigma_2 i k_{\perp}^2 k_z & -g \frac{\beta T_0}{c_p} k_{\perp}^2 & \sigma_3 k^2 & -\frac{\Omega}{\rho_0} K_I k^4 \\ 0 & -\lambda \frac{i k_{\perp}^2 k_z}{k^2} & 0 & \Omega & \frac{K_L}{\gamma_1} k^2 \end{array} \right) \quad (4.70)$$

y

$$M^T = \begin{pmatrix} \sigma_4 k^2 & -\frac{\lambda_+ K_{II}}{\rho_0} i k^2 k_z \\ -\lambda_+ i k_z & \frac{K_{II}}{\gamma_1} k^2 \end{pmatrix}. \quad (4.71)$$

en las cuales se ha definido

$$D_T \equiv \frac{1}{k^2} \left(\chi_\perp k_\perp^2 + \chi_\parallel k_\parallel^2 \right), \quad (4.72)$$

$$\sigma_1 \equiv \frac{1}{\rho_0 k^4} [(\nu_2 + \nu_4) k_\perp^4 + 2(2\nu_3 + \nu_5) k_\parallel^2 k_\perp^2 + (2\nu_1 + \nu_2 - \nu_4 + 2\nu_5) k_\parallel^4], \quad (4.73)$$

$$\sigma_2 \equiv \frac{1}{\rho_0 k^2} \left[(-\nu_2 + 2\nu_3 - \nu_4 + \nu_5) k_\perp^2 + (2\nu_1 + \nu_2 - 2\nu_3 - \nu_4 + \nu_5) k_\parallel^2 \right], \quad (4.74)$$

$$\sigma_3 \equiv \frac{1}{\rho_0 k^4} \left[2(\nu_1 + \nu_2) k_\parallel^2 k_\perp^2 + \nu_3 (k_\parallel^2 - k_\perp^2)^2 \right], \quad (4.75)$$

$$\sigma_4 \equiv \frac{1}{\rho_0 k^2} \left(\nu_2 k_\perp^2 + \nu_3 k_\parallel^2 \right), \quad (4.76)$$

$$K_I \equiv \frac{1}{k^2} \left(K_1 k_\perp^2 + K_3 k_\parallel^2 \right), \quad (4.77)$$

$$K_{II} \equiv \frac{1}{k^2} \left(K_2 k_\perp^2 + K_3 k_\parallel^2 \right), \quad (4.78)$$

$$\Omega \equiv \frac{1}{k^2} \left(\lambda_- k_\perp^2 - \lambda_+ k_\parallel^2 \right), \quad (4.79)$$

$$\lambda_- \equiv \frac{1}{2} (\lambda - 1), \quad \lambda_+ \equiv \frac{1}{2} (\lambda + 1). \quad (4.80)$$

Debe notarse que D_T tiene dimensiones y orden de magnitud de los coeficientes de difusividad térmica $\chi_\perp, \chi_\parallel$. Las cantidades $\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3, \sigma_4$, tienen valores comparables con los coeficientes ν_j/ρ_0 , $j = 1 \dots 5$, mientras K_I, K_{II} , tienen valores similares a los de las constantes elásticas K_j , $j = 1, 2, 3$. Adicionalmente, las cantidades Ω, λ_- y λ_+ , que dependen del parámetro adimensional λ introducido en la ecuación (1.80), son una medida de la anisotropía del nemático.

Los términos estocásticos $\vec{\Theta}(\vec{k}, t)$ señalados en la ecuación (4.65) están dados por el vector columna

$$\vec{\Theta}(\vec{k}, t) = \left(\vec{\Theta}^L, \vec{\Theta}^T \right)^\dagger \quad (4.81)$$

con

$$\vec{\Theta}^L(\vec{k}, t) = \begin{pmatrix} -\frac{i(\gamma-1)}{\beta T_0} k_j \tilde{\pi}_j \\ -\frac{k_j}{\rho_0} \left(k_x \tilde{\Sigma}_{xj} + k_y \tilde{\Sigma}_{yj} + k_z \tilde{\Sigma}_{zj} \right) \\ -\frac{ik_l}{\rho_0 T_0} \tilde{\pi}_l \\ -\frac{ik_z k_j}{\rho_0} \left(k_x \tilde{\Sigma}_{xj} + k_y \tilde{\Sigma}_{yj} + k_z \tilde{\Sigma}_{zj} \right) + \frac{ik^2}{\rho_0} k_j \tilde{\Sigma}_{zj} \\ ik_x \Upsilon_x + ik_y \Upsilon_y \end{pmatrix} \quad (4.82)$$

y

$$\vec{\Theta}^T(\vec{k}, t) = \begin{pmatrix} -\frac{k_j}{\rho_0} \left(k_x \tilde{\Sigma}_{yj} - k_y \tilde{\Sigma}_{xj} \right) \\ ik_x \tilde{\Upsilon}_y - ik_y \tilde{\Upsilon}_x \end{pmatrix}. \quad (4.83)$$

Como resultado de este cambio de representación, el sistema de ecuaciones original (4.56)-(4.62) se simplifica en dos sistemas de ecuaciones desacoplados: uno de cinco ecuaciones constituido por las variables longitudinales $\delta \vec{X}^L$, ecuación (4.67), y otro de dos ecuaciones determinado por las variables transversales $\delta \vec{X}^T$,

ecuación (4.68). Si bien los ruidos $\vec{\Theta}^L$ y $\vec{\Theta}^T$ cuentan con componentes que dependen tanto de $\tilde{\Sigma}_{ij}$ como $\tilde{\Upsilon}_i$, no se encuentran correlacionados entre sí¹.

Por último, es importante señalar que los efectos de no equilibrio ocasionados por la presencia de los gradientes externos α y g sólo afectan a las variables longitudinales.

4.2.5. Nemático en equilibrio y fluido simple en un sistema de Rayleigh-Bénard

Dos situaciones físicas de gran interés, se desprenden de forma natural de la descripción hidrodinámica realizada hasta este momento para un nemático en el estado estacionario fuera del equilibrio considerado. La primera, corresponde a las ecuaciones dinámicas de un nemático en el estado de equilibrio y, la segunda, a las de un fluido simple en un sistema de Rayleigh-Bénard. A continuación se discuten ambas.

4.2.5.1. Nemático en el estado de equilibrio

Si se suprimen en las ecuaciones (4.65) los términos que contienen α y g , las ecuaciones resultantes describen a un cristal líquido nemático en el estado de equilibrio (identificado por el subíndice E). En este caso la matriz hidrodinámica (4.69) se reduce a

$$M_E = \left(\begin{array}{c|c} M_E^L & 0 \\ \hline 0 & M_E^T \end{array} \right), \quad (4.84)$$

con

$$M_E^L = \begin{pmatrix} (\gamma - 1) D_T k^2 & \rho_0 c_s^2 & \frac{\rho_0}{\beta} (\gamma - 1) D_T k^2 & 0 & 0 \\ -\frac{k^2}{\rho_0} & \sigma_1 k^2 & 0 & \sigma_2 i k_z & -\frac{\lambda K_{II}}{\rho_0} i k^2 k_z \\ \frac{\beta}{\rho_0} D_T k^2 & 0 & D_T k^2 & 0 & 0 \\ 0 & -\sigma_2 i k_{\perp}^2 k_z & 0 & \sigma_3 k^2 & -\frac{\Omega}{\rho_0} K_I k^4 \\ 0 & -\lambda \frac{i k_{\perp}^2 k_z}{k^2} & 0 & \Omega & \frac{K_{II}}{\gamma_1} k^2 \end{pmatrix} \quad (4.85)$$

y

$$M_E^T = \begin{pmatrix} \sigma_4 k^2 & -\frac{\lambda_+ K_{II}}{\rho} i k^2 k_z \\ -\lambda_+ i k_z & \frac{K_{II}}{\gamma_1} k^2 \end{pmatrix}. \quad (4.86)$$

En el estado de equilibrio, dado que (4.84) mantiene la misma estructura por bloques mostrada por (4.69), las variables longitudinales y transversales siguen estando desacopladas. Además, M_E^L contiene más entradas nulas y es más simple que M^L , en tanto que M_E^T es idéntica a M^T .

4.2.5.2. Fluido simple en un sistema de Rayleigh-Bénard

Dado que en el límite isótropo (que corresponde al del fluido simple) $n_i \rightarrow 0$, las constantes elásticas K_j (para $j = 1, 2, 3$) y los parámetros cinéticos γ_1, λ se anulan. Además, $\chi_{\perp}, \chi_{\parallel}$, se reducen al coeficiente de

¹En la siguiente sección se reescribe el sistema (4.65) en términos de sus variables con la misma dimensión. En el Apéndice A se muestran, para el nuevo sistema reescrito, todas las correlaciones posibles entre las componentes de sus ruidos longitudinales y transversales. Se encuentra que sólo están correlacionadas entre sí algunas componentes longitudinales y ciertas transversales; por lo tanto, no existen correlaciones cruzadas de componentes longitudinales con transversales y viceversa.

difusividad térmica χ y, consecuentemente, $\chi_a = 0$. Por otra parte, las viscosidades nemáticas se reducen a $\nu_1 \rightarrow \eta$, $\nu_2 \rightarrow \eta$, $\nu_3 \rightarrow \eta$, $\nu_4 \rightarrow \zeta + \frac{1}{3}\eta$, $\nu_5 \rightarrow -\frac{2}{3}\eta + \zeta$, en donde η , ζ , denotan, respectivamente, las viscosidades de corte y volumétrica de un fluido simple. Como resultado, de las ecuaciones (4.72)-(4.79) se sigue que en el límite isótropo $D_T \rightarrow \chi$, $\sigma_1 \rightarrow \frac{1}{\rho_0} (\frac{4}{3}\eta + \zeta)$, $\sigma_2 \rightarrow 0$, $\sigma_3 \rightarrow \nu$, $\sigma_4 \rightarrow \nu$, en donde $\nu \equiv \eta/\rho_0$ es la viscosidad cinemática, mientras que $K_I \rightarrow 0$, $K_{II} \rightarrow 0$ y $\Omega \rightarrow 0$. De esta manera, la matriz (4.69) se simplifica como

$$M^{Fs} = \begin{pmatrix} (\gamma - 1) \chi k^2 & \rho_0 c_s^2 + g \frac{\rho_0 i k_z}{k^2} & \frac{\rho_0}{\beta} (\gamma - 1) \chi k^2 & -g \frac{\rho_0}{k^2} & 0 \\ -\frac{k^2}{\rho_0} + g \frac{i k_z}{\rho_0 c_s^2} & \frac{1}{\rho_0} (\frac{4}{3}\eta + \zeta) k^2 & -g \frac{\beta T_0}{c_p} i k_z & 0 & 0 \\ \frac{\beta}{\rho_0} \chi k^2 & -X \frac{c_p i k_z}{T_0 k^2} & \chi k^2 & X \frac{c_p}{T_0 k^2} & 0 \\ g \frac{k^2}{\rho_0 c_s^2} & 0 & -g \frac{\beta T_0}{c_p} k_{\perp}^2 & \nu k^2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \nu k^2 \end{pmatrix}. \quad (4.87)$$

Debe notarse que (4.87), al contener el gradiente de temperatura efectivo X , representa una generalización de la ecuación (6) dada en la referencia [63]; en equilibrio, es decir, cuando X y g son nulas, ésta se reduce a la ecuación (4) dada en la misma referencia.

4.3. Modos hidrodinámicos

Con la finalidad de facilitar el cálculo de los modos hidrodinámicos, definiremos las variables siguientes las cuales poseen la misma dimensión $[z_j(\vec{k}, t)] = M^{1/2} L^{5/2} t^{-1}$ (para $j = 1, \dots, 7$),

$$\begin{aligned} z_1(\vec{k}, t) &\equiv \left(\frac{1}{\rho_0 c_s^2}\right)^{1/2} \delta \tilde{p}, & z_5(\vec{k}, t) &\equiv \left(\frac{\rho_0 c_s^2}{k^2}\right)^{1/2} \delta \tilde{f}_1, \\ z_2(\vec{k}, t) &\equiv \left(\frac{\rho_0}{k^2}\right)^{1/2} \delta \tilde{\varphi}, & z_6(\vec{k}, t) &\equiv \left(\frac{\rho_0}{k^2}\right)^{1/2} \delta \tilde{\psi}, \\ z_3(\vec{k}, t) &\equiv \left(\frac{\rho_0 T_0}{c_p}\right)^{1/2} \delta \tilde{s}, & z_7(\vec{k}, t) &\equiv \left(\frac{\rho_0 c_s^2}{k^2}\right)^{1/2} \delta \tilde{f}_2. \\ z_4(\vec{k}, t) &= \left(\frac{\rho_0}{k^4}\right)^{1/2} \delta \tilde{\xi}, \end{aligned} \quad (4.88)$$

El sistema (4.65) expresado en términos de estas variables queda reescrito como

$$\frac{\partial}{\partial t} \vec{Z}(\vec{k}, t) = -N \vec{Z}(\vec{k}, t) + \vec{\Xi}(\vec{k}, t), \quad (4.89)$$

en donde

$$\vec{Z}(\vec{k}, t) = \left(\vec{Z}^L, \vec{Z}^T\right)^\dagger \quad (4.90)$$

es el vector de la variables longitudinales

$$\vec{Z}^L(\vec{k}, t) = (z_1, z_2, z_3, z_4, z_5)^\dagger \quad (4.91)$$

y transversales

$$\vec{Z}^T(\vec{k}, t) = (z_6, z_7)^\dagger. \quad (4.92)$$

La matriz hidrodinámica N

$$N = \left(\begin{array}{c|c} N^L & 0 \\ \hline 0 & N^T \end{array} \right) \quad (4.93)$$

está compuesta por las submatrices

$$N^L = \begin{pmatrix} (\gamma - 1) D_T k^2 & c_s k + \frac{g}{c_s} \frac{ik_z}{k} & (\gamma - 1)^{1/2} D_T k^2 & -\frac{g}{c_s} & \alpha \beta \chi_a k \\ -c_s k + \frac{g}{c_s} \frac{ik_z}{k} & \sigma_1 k^2 & -(\gamma - 1)^{1/2} \frac{g}{c_s} \frac{ik_z}{k} & \sigma_2 ik k_z & -\frac{\lambda K_L}{\rho_0 c_s} ik^2 k_z \\ (\gamma - 1)^{1/2} D_T k^2 & -\frac{\beta X c_s}{(\gamma - 1)^{1/2}} \frac{ik_z}{k} & D_T k^2 & \frac{\beta X c_s}{(\gamma - 1)^{1/2}} & \frac{\alpha \beta \chi_a}{(\gamma - 1)^{1/2}} k \\ \frac{g}{c_s} \frac{k_z^2}{k^2} & -\sigma_2 \frac{ik_z^2 k_z}{k} & -(\gamma - 1)^{1/2} \frac{g}{c_s} \frac{k_z^2}{k^2} & \sigma_3 k^2 & -\frac{\Omega K_L}{\rho_0 c_s} k^3 \\ 0 & -\lambda c_s \frac{ik_z^2 k_z}{k^2} & 0 & \Omega c_s k & \frac{K_L}{\gamma_1} k^2 \end{pmatrix} \quad (4.94)$$

y

$$N^T = \begin{pmatrix} \sigma_4 k^2 & -\frac{\lambda + K_{II}}{\rho_0 c_s} ik^2 k_z \\ -\lambda_+ c_s ik_z & \frac{K_{II}}{\gamma_1} k^2 \end{pmatrix}. \quad (4.95)$$

Puede verificarse fácilmente que la dimensión de cada entrada N_{ij} de la matriz N es $[N_{ij}] = t^{-1}$. Más aún, en la ecuación (4.89) el término estocástico

$$\vec{\Xi}(\vec{k}, t) = \left(\vec{\Xi}^L, \vec{\Xi}^T \right)^\dagger, \quad (4.96)$$

está constituido por los vectores de ruido longitudinal

$$\vec{\Xi}^L(\vec{k}, t) = (\zeta_1, \zeta_2, \zeta_3, \zeta_4, \zeta_5)^\dagger \quad (4.97)$$

y transversal

$$\vec{\Xi}^T(\vec{k}, t) = (\zeta_6, \zeta_7)^\dagger. \quad (4.98)$$

Las componentes ζ_m ($m = 1, \dots, 7$), de los ruidos (4.97) y (4.98), están indicadas explícitamente en las relaciones (A.1) a (A.7) del Apéndice A. Al tomar en consideración las relaciones de fluctuación-disipación dadas por las ecuaciones (4.31) a (4.31), pueden hallarse las funciones de autocorrelación y de correlación cruzada de los ruidos ζ_m promediadas sobre el estado estacionario. Estas correlaciones están dadas por las ecuaciones (A.8) a (A.18) indicadas también en el Apéndice A.

Al considerar las definiciones (4.91), (4.94) y (4.97), así como las (4.92), (4.95) y (4.98), el sistema (4.89) da lugar a los dos sistemas de ecuaciones estocásticas lineales

$$\frac{\partial}{\partial t} \vec{Z}^L(\vec{k}, t) = -N^L \vec{Z}^L(\vec{k}, t) + \vec{\Xi}^L(\vec{k}, t) \quad (4.99)$$

y

$$\frac{\partial}{\partial t} \vec{Z}^T(\vec{k}, t) = -N^T \vec{Z}^T(\vec{k}, t) + \vec{\Xi}^T(\vec{k}, t), \quad (4.100)$$

que determinan, respectivamente, la evolución de las variables longitudinales \vec{Z}^L y transversales \vec{Z}^T . Ambos sistemas de ecuaciones también son independientes entre sí.

Con el propósito de encontrar los modos hidrodinámicos, o tasas de decaimiento [62], del sistema lineal (4.89), requerimos, de acuerdo con la definición (4.63), aplicar la transformada de Fourier (con respecto a t) a este conjunto de ecuaciones. Como consecuencia se obtiene un sistema algebraico de ecuaciones en términos

de las variables \vec{k} y ω . Los modos hidrodinámicos son obtenidos al calcular sus eigenvalores $\lambda = i\omega$, los cuales están determinados por las raíces de la ecuación característica

$$p(\lambda) = p^L(\lambda)p^T(\lambda) = 0, \quad (4.101)$$

en donde $p^L(\lambda)$ y $p^T(\lambda)$ son, respectivamente, los polinomios característicos de quinto y segundo orden en λ de las matrices N^L y N^T . Estas raíces se calculan a continuación.

4.3.1. Modos longitudinales

Si escribimos al conjunto de variables longitudinales de igual dimensión (4.91) como $\vec{Z}^L = \left(\vec{Z}_X^L, \vec{Z}_Y^L \right)^\dagger$, en donde $\vec{Z}_X^L = (z_1, z_2)^\dagger$ y $\vec{Z}_Y^L = (z_3, z_4, z_5)^\dagger$, puede mostrarse (ver el Apéndice B) que en el sistema (4.99), dentro de una muy buena aproximación, las variables $\delta\vec{Z}_X^L$ y $\delta\vec{Z}_Y^L$ son mutuamente independientes. Esta aproximación permite separar al sistema de ecuaciones (4.99) en los dos sistemas desacoplados

$$\frac{\partial}{\partial t} \vec{Z}_X^L(\vec{k}, t) = -N_{XX}^L \vec{Z}_X^L(\vec{k}, t) + \vec{\Xi}_X^L(\vec{k}, t), \quad (4.102)$$

y

$$\frac{\partial}{\partial t} \vec{Z}_Y^L(\vec{k}, t) = -N_{YY}^L \vec{Z}_Y^L(\vec{k}, t) + \vec{\Xi}_Y^L(\vec{k}, t). \quad (4.103)$$

en donde

$$N_{XX}^L = \begin{pmatrix} (\gamma - 1) D_T k^2 & c_s k + \frac{g}{c_s} \frac{ik_z}{k} \\ -c_s k + \frac{g}{c_s} \frac{ik_z}{k} & \sigma_1 k^2 \end{pmatrix}, \quad (4.104)$$

$$N_{YY}^L = \begin{pmatrix} D_T k^2 & \frac{\beta X c_s}{(\gamma - 1)^{1/2}} & \frac{\alpha \beta \chi_a}{(\gamma - 1)^{1/2}} k \\ -(\gamma - 1)^{1/2} \frac{g}{c_s} \frac{k_z^2}{k^2} & \sigma_3 k^2 & -\frac{\Omega K_I}{\rho_0 c_s} k^3 \\ 0 & \Omega c_s k & \frac{K_I}{\gamma_1} k^2 \end{pmatrix} \quad (4.105)$$

y $\vec{\Xi}_X^L(\vec{k}, t) = (\zeta_1, \zeta_2)^\dagger$, $\vec{\Xi}_Y^L(\vec{k}, t) = (\zeta_3, \zeta_4, \zeta_5)^\dagger$ son términos de ruido longitudinal. Por consiguiente, puede reescribirse al polinomio característico de las variables longitudinales como

$$p^L(\lambda) = p_{XX}^L(\lambda)p_{YY}^L(\lambda), \quad (4.106)$$

en donde

$$p_{XX}^L(\lambda) = \lambda^2 - [(\gamma - 1) D_T k^2 + \sigma_1 k^2] \lambda + (\gamma - 1) \sigma_1 k^2 D_T k^2 + k^2 c_s^2 + \frac{g^2}{c_s^2} \frac{k_z^2}{k^2} \quad (4.107)$$

y

$$p_{YY}^L(\lambda) = \lambda^3 - \left(D_T k^2 + \sigma_3 k^2 + \frac{K_I k^2}{\gamma_1} \right) \lambda^2 + \left(D_T k^2 \sigma_3 k^2 + D_T k^2 \frac{K_I k^2}{\gamma_1} + \sigma_3 k^2 \frac{K_I k^2}{\gamma_1} + \frac{\Omega^2 K_I k^4}{\rho_0} + g X \beta \frac{k_z^2}{k^2} \right) \lambda - D_T k^2 \sigma_3 k^2 \frac{K_I k^2}{\gamma_1} - D_T k^2 \frac{\Omega^2 K_I k^4}{\rho_0} - g X \beta \frac{k_z^2}{k^2} \frac{K_I k^2}{\gamma_1} + g \alpha \beta \frac{k_z^2}{k^2} \Omega \chi_a k^2. \quad (4.108)$$

Si bien no existe dificultad para resolver analíticamente las ecuaciones cuadrática (4.107) y cúbica (4.108), la forma explícita de sus raíces exactas puede ser bastante complicada, especialmente para la última. No obstante, es posible estimarlas siguiendo un procedimiento basado parcialmente en el método sugerido en la referencia [10], el cual nos permite identificar las siguientes cantidades en la ecuación (4.107), a saber, $(\gamma - 1) D_T k^2$, $\sigma_1 k^2$, $k^2 c_s^2$ y $g^2 k_z^2 / (c_s^2 k^2)$. Estas dependen del coeficiente de difusión térmica D_T , la viscosidad σ_1 , así como del campo gravitacional g y la velocidad adiabática del sonido c_s . Similarmente, en la ecuación (4.108) también pueden identificarse las cantidades $g\alpha\beta \frac{k_\perp^2}{k^2}$, $gX\beta \frac{k_\perp^2}{k^2}$, $D_T k^2$, $\Omega\chi_a k^2$, $\sigma_3 k^2$, $\frac{K_1}{\gamma_1} k^2$, $\frac{\Omega^2 K_I}{\rho_0} k^4$, las cuales dependen de parámetros materiales del nemático, tales como los coeficientes de difusividad térmica χ_\parallel , χ_\perp , el coeficiente de viscosidad ν_3 , las constantes elásticas K_1 , K_3 , así como el gradiente de temperatura α y el campo gravitacional g . Resulta útil comparar estas cantidades con $\bar{\omega} \equiv c_s k$, mediante la introducción de las cantidades adimensionales pequeñas o reducidas longitudinales

$$\begin{aligned} a_0 &\equiv \frac{g\alpha\beta}{\bar{\omega}^2} \frac{k_\perp^2}{k^2}, & a'_0 &\equiv \frac{gX\beta}{\bar{\omega}^2} \frac{k_\perp^2}{k^2}, & a''_0 &\equiv \frac{g^2 k_z^2}{\bar{\omega}^2 c_s^2 k^2}, & a_1 &\equiv \frac{D_T k^2}{\bar{\omega}}, & a'_1 &\equiv \frac{\Omega\chi_a k^2}{\bar{\omega}}, \\ a_2 &\equiv \frac{\sigma_1 k^2}{\bar{\omega}}, & a_3 &\equiv \frac{\sigma_3 k^2}{\bar{\omega}}, & a_5 &\equiv \frac{K_I k^2}{\gamma_1 \bar{\omega}}, & a_6 &\equiv \frac{\Omega^2 K_I k^4}{\rho_0 \bar{\omega}^2}. \end{aligned} \quad (4.109)$$

Para la mayoría de los nemáticos a temperatura ambiente, $\rho_0 \simeq 1g/cm^3$ y $\Omega \sim 1$, además $\gamma_1 \sim 10^{-1}g/(cm\ s)$, $\chi_i \sim (10^{-3} - 10^{-2})\ cm^2/s$, $\nu_i \sim (10^{-3} - 10^{-2})\ g/(cm\ s)$ y $K_i \sim (10^{-7} - 10^{-6})\ g\ cm/s^2$, mientras que $\beta \sim 10^{-4}K^{-1}$ [46]. Consideraremos que $\alpha \lesssim 10^2 K/cm$ y $g \simeq 980\ cm/s^2$ ($\sim 10^3\ cm/s^2$). Dado que en experimentos típicos de dispersión de luz $k = 10^5\ cm^{-1}$ y $c_s = 1.5 \times 10^5\ cm/s$ [12], las cantidades dadas en las definiciones (4.109) poseen los siguientes órdenes de magnitud: $a_0 \sim 10^{-21}$, $a'_0 \sim 10^{-21}$, $a''_0 \sim 10^{-24}$, $a_1 \sim 10^{-3}$, $a'_1 \sim 10^{-3}$, $a_2 \sim 10^{-2}$, $a_3 \sim 10^{-2}$, $a_5 \sim 10^{-5}$ y $a_6 \sim 10^{-6}$. Si se siguiera estrictamente el tratamiento de la referencia [10], se obtendría una aproximación de las soluciones de las ecuaciones (4.107) y (4.108) por medio de un método perturbativo dado en términos de dichas cantidades pequeñas. Sin embargo, reemplazaremos esta estimación por otra, en la que se parte de las raíces exactas de las ecuaciones (4.107)-(4.108) reescritas en términos de las cantidades pequeñas (4.109), para luego simplificarlas considerando los términos dominantes que contienen estas cantidades. Este procedimiento será implementado en esta subsección y la siguiente.

4.3.1.1. Modos longitudinales acústicos

De acuerdo con la ecuación (4.107), los modos de propagación acústicos son las raíces de la ecuación característica $p_{XX}^L(\lambda) = 0$. En términos de la variable $\bar{s} \equiv \lambda/\bar{\omega}$ y las cantidades pequeñas definidas en (4.109), esta ecuación característica puede reescribirse como

$$p_{XX}^L(\bar{s}) = \bar{s}^2 + A'_1 \bar{s} + A'_2 = 0, \quad (4.110)$$

en donde $p_{XX}^L(\bar{s}) \equiv p_{XX}^L(\lambda)/\bar{\omega}^2$, y

$$A'_1 \equiv -[(\gamma - 1) a_1 + a_2], \quad (4.111)$$

$$A'_2 \equiv 1 + (\gamma - 1) a_1 a_2 + a''_0. \quad (4.112)$$

Las soluciones analíticas de la ecuación (4.110) son

$$\bar{s}_+ \simeq -\frac{1}{2}A'_1 + \frac{1}{2}\sqrt{\Delta'}, \quad (4.113)$$

$$\bar{s}_- \simeq -\frac{1}{2}A'_1 - \frac{1}{2}\sqrt{\Delta'}, \quad (4.114)$$

en las cuales

$$\Delta' \equiv (A'_1)^2 - 4A'_2 \quad (4.115)$$

es el discriminante. Su signo determina la naturaleza de las raíces (4.113) y (4.114), las cuales sólo pueden presentar una de las siguientes tres características: dos raíces reales y distintas, si $\Delta' > 0$; dos raíces reales e idénticas, si $\Delta' = 0$ y dos raíces complejas conjugadas, cuando $\Delta' < 0$. De esta manera, de acuerdo con los órdenes de magnitud de las cantidades pequeñas (4.109) en los coeficientes (4.111) y (4.112), el discriminante (4.115) puede simplificarse como $\Delta' \simeq -4$, dado que $a_2, a_1, a''_0 \ll 1$. De hecho, siempre $\Delta' < 0$. Dado que $a''_0 \sim 10^{-24}$, el efecto del campo gravitatorio externo g en Δ' , y por ende, en \bar{s}_+ y \bar{s}_- , es despreciable. Por consiguiente, las soluciones (4.113) y (4.114) serán complejas conjugadas,

$$\bar{s}_+ \simeq \frac{1}{2}[(\gamma - 1)a_1 + a_2] + i, \quad (4.116)$$

$$\bar{s}_- \simeq \frac{1}{2}[(\gamma - 1)a_1 + a_2] - i. \quad (4.117)$$

Reescribiendo estas raíces en términos de las variables λ_i por medio de la relación $\bar{s} \equiv \lambda/\bar{\omega}$, se obtiene

$$\lambda_1 \simeq \Gamma k^2 + ic_s k, \quad (4.118)$$

$$\lambda_2 \simeq \Gamma k^2 - ic_s k, \quad (4.119)$$

en donde

$$\Gamma \equiv \frac{1}{2}[(\gamma - 1)D_T + \sigma_1] \quad (4.120)$$

es el coeficiente de atenuación del sonido del fluido nemático. Debe señalarse que los modos de propagación acústicos hallados, ecuaciones (4.118) y (4.119), están en completa concordancia con aquellos ya reportados en la literatura para nemáticos [52], [58].

4.3.1.2. Modos longitudinales visco-calóricos y del director

Estos modos son las raíces de la ecuación característica $p_{YY}^L(\lambda) = 0$. En términos de la variable $\bar{s} \equiv \lambda/\bar{\omega}$ y las cantidades pequeñas (4.109), esta ecuación puede escribirse como

$$p_{YY}^L(\bar{s}) = \bar{s}^3 + A_1^2 \bar{s}^2 + A_2 \bar{s} + A_3 = 0, \quad (4.121)$$

en donde $p_{YY}^L(\bar{s}) \equiv p_{YY}^L(\lambda)/\bar{\omega}^3$, y

$$A_1 \equiv -a_1 - a_3 - a_5, \quad (4.122)$$

$$A_2 \equiv a_1 a_3 + a_1 a_5 + a_3 a_5 + a_6 + a'_0, \quad (4.123)$$

$$A_3 \equiv -a_1 a_3 a_5 - a_1 a_6 - a'_0 a_5 + a_0 a'_1. \quad (4.124)$$

Cabe señalar que todos los coeficientes en la ecuación (4.121) son menores a la unidad y que sus soluciones exactas pueden escribirse como

$$\bar{s}_3 = -\frac{A_1}{3} - \frac{\sqrt[3]{2}(3A_2 - A^2)}{3F} + \frac{\bar{F}}{3\sqrt[3]{2}}, \quad (4.125)$$

$$\bar{s}_4 = -\frac{A_1}{3} + \frac{(1 + i\sqrt{3})(3A_2 - A_1^2)}{2^{2/3}3F} - \frac{(1 - i\sqrt{3})\bar{F}}{6\sqrt[3]{2}}, \quad (4.126)$$

$$\bar{s}_5 = -\frac{A_1}{3} + \frac{(1 - i\sqrt{3})(3A_2 - A_1^2)}{2^{2/3}3F} - \frac{(1 + i\sqrt{3})\bar{F}}{6\sqrt[3]{2}}, \quad (4.127)$$

siendo

$$\bar{F} \equiv \sqrt[3]{-2A_1^3 + 9A_1A_2 - 27A_3 + 3\sqrt{3}\sqrt{\Delta}} \quad (4.128)$$

con el discriminante

$$\Delta \equiv -A_1^2 A_2^2 + 4A_2^3 + 4A_1^3 A_3 - 18A_1 A_2 A_3 + 27A_3^2. \quad (4.129)$$

El signo de Δ determina la naturaleza de las raíces \bar{s}_i (con $i = 3, 4, 5$), siendo éstas una raíz real y dos complejas conjugadas, si $\Delta < 0$; tres raíces reales distintas, si $\Delta > 0$; y tres raíces reales, una diferente y dos idénticas, si $\Delta = 0$. En el Apéndice B se muestra que las raíces (4.125) a (4.127), hasta primer orden en las cantidades pequeñas (4.109), pueden aproximarse como

$$\bar{s}_{3,4} \simeq \frac{1}{2} \left(a_1 + a_3 - \frac{a_6}{a_3} \right) \mp \frac{1}{2} \sqrt{\left(a_1 + a_3 - \frac{a_6}{a_3} \right)^2 - 4a_1 a_3 \left(1 - \frac{R}{R_c} \right)}, \quad (4.130)$$

$$\bar{s}_5 \simeq a_5 + \frac{a_6}{a_3}, \quad (4.131)$$

con

$$\frac{R}{R_c} \equiv - \left(\frac{a'_0}{a_1 a_3} + \frac{a_0 a'_1}{a_1^2 a_3} + \frac{a_0 a'_1}{a_1 a_3^2} \right). \quad (4.132)$$

En esta ecuación $R \equiv \frac{\beta g \Delta T d^3}{\sigma_3 \chi}$ es el número de Rayleigh y R_c denota su valor crítico por encima del cual se establece la convección. Debe enfatizarse que nuestros resultados están expresados en términos de la razón R/R_c y son, por lo tanto, independientes del valor de la separación d entre las placas. Sin embargo, el valor apropiado de d en un experimento debe ser escogido de acuerdo con un criterio experimental [132]. El radicando en la ecuación (4.130) es el discriminante

$$\Delta \equiv \left(a_1 + a_3 - \frac{a_6}{a_3} \right)^2 - 4a_1 a_3 \left(1 - \frac{R}{R_c} \right). \quad (4.133)$$

De acuerdo con los órdenes de magnitud de las cantidades pequeñas (4.109), en la expresión (4.133) sólo es posible el caso $\Delta > 0$. Consecuentemente, las raíces (4.130)-(4.131) son reales y distintas. En términos de las variables λ_i , estas raíces pueden escribirse como

$$\begin{aligned} \lambda_{3,4} &= \frac{1}{2} \left(D_T k^2 + \sigma_3 k^2 - \frac{\Omega^2 K_I k^2}{\rho_0 \sigma_3} \right) \\ &\mp \frac{1}{2} \sqrt{\left(D_T k^2 + \sigma_3 k^2 - \frac{\Omega^2 K_I k^2}{\rho_0 \sigma_3} \right)^2 - 4D_T \sigma_3 k^4 \left(1 - \frac{R}{R_c} \right)}, \end{aligned} \quad (4.134)$$

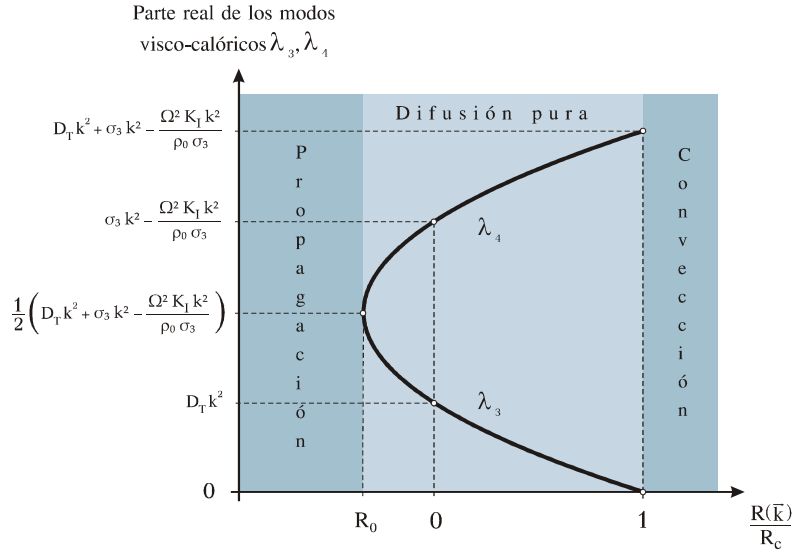


Figura 4.2: Representación esquemática de la parte real de las tasas de decaimiento visco-calóricas λ_3 y λ_4 como función del la razón de Rayleigh $R(\vec{k})/R_c$. Si $R(\vec{k})/R_c < R_0$, entonces ambas son propagativas. Cuando $R_0 \leq R(\vec{k})/R_c \leq 1$, son completamente difusivas. Así, si $R(\vec{k})/R_c = R_0$, entonces $\lambda_{3,4} = \frac{1}{2} \left(D_T k^2 + \sigma_3 k^2 - \frac{\Omega^2 K_I k^2}{\rho_0 \sigma_3} \right)$; cuando $R(\vec{k})/R_c = 0$ (es decir, en el límite de equilibrio), $\lambda_3 \simeq D_T k^2$ y $\lambda_4 \simeq \sigma_3 k^2 - \frac{\Omega^2 K_I k^2}{\rho_0 \sigma_3}$. Eventualmente, si $R(\vec{k})/R_c = 1$ (al inicio del régimen convectivo), entonces $\lambda_3 = 0$ y $\lambda_4 = D_T k^2 + \sigma_3 k^2 - \frac{\Omega^2 K_I k^2}{\rho_0 \sigma_3}$.

$$\lambda_5 = \frac{K_I k^2}{\gamma_1} + \frac{\Omega^2 K_I k^2}{\rho_0 \sigma_3}, \quad (4.135)$$

en donde la ecuación (4.132) ha sido reescrita en la forma

$$\frac{R(\vec{k})}{R_c} \equiv -\frac{g\beta\hat{k}_\perp^2}{D_T\sigma_3 k^4} \left[X + \frac{\alpha\Omega\chi_a}{D_T\sigma_3} (\sigma_3 + D_T) \right], \quad (4.136)$$

siendo $\hat{k}_\perp^2 \equiv k_\perp^2/k^2$. El cociente de Rayleigh $R(\vec{k})/R_c$ contiene dos contribuciones: el primer término es debido a la presencia del gradiente de temperatura efectivo X , el cual depende, tanto del gradiente de temperatura α como del campo gravitatorio g . El segundo término es completamente una contribución debida a α y a la anisotropía nemática χ_a . Para nemáticos típicos y experimentos de dispersión de luz convencionales, ambas contribuciones son aproximadamente de orden 10^{-16} . Si consideramos el límite del fluido simple, entonces la ecuación (4.136) se reduce a la (2.21) dada en la referencia [62].

Las tasas de decaimiento λ_3 y λ_4 para un nemático inhomogéneo dadas por (4.134), se denominan como modos visco-calóricos, debido a que están constituidas por el acoplamiento entre los modos difusivos térmico $D_T k^2$ y de cizalla $\sigma_3 k^2 - \frac{\Omega^2 K_I k^2}{\rho_0 \sigma_3}$ por medio de la razón $R(\vec{k})/R_c$. La naturaleza de estos modos puede ser propagativa o difusiva, tal como se mostrará a continuación.

4.3.1.3. Valores de $R(\vec{k})/R_c$

Los tres modos nemáticos (4.134)-(4.135) podrían ser dos propagativos y uno difusivo, o todos ellos completamente difusivos. Su naturaleza, como se mostrará abajo, depende de los valores asumidos por el cociente $R(\vec{k})/R_c$. Para fluidos simples, estas características han sido predichas teóricamente y corroboradas experimentalmente. En este sentido, los siguientes resultados sugieren que podría ser posible también verificarlos experimentalmente para nemáticos.

Modos propagativos y difusivo Se ha mencionado ya que debido a los órdenes de magnitud de las cantidades pequeñas (4.109), los modos nemáticos (4.134) y (4.135) son reales y diferentes. Sin embargo, podría ocurrir que estos modos puedan ser transformados en una raíz real y dos complejas conjugadas. De la expresión general para $\lambda_{3,4}$ dada por la ecuación (4.134), puede verse que las tasas de decaimiento visco-calóricas llegan a ser complejas conjugadas cuando $R(\vec{k})/R_c < R_0(\vec{k})$, en donde

$$R_0(\vec{k}) \equiv -\frac{\left[\left(\sigma_3 - \frac{\Omega^2 K_I}{\rho_0 \sigma_3}\right) - D_T\right]^2}{4D_T \sigma_3}, \quad (4.137)$$

que siempre es negativa. Estas tasas pueden ser reescritas como

$$\lambda_3(\vec{k}) = \Omega_0(\vec{k}) - i\Lambda_0(\vec{k}), \quad (4.138)$$

$$\lambda_4(\vec{k}) = \Omega_0(\vec{k}) + i\Lambda_0(\vec{k}), \quad (4.139)$$

en donde

$$\Omega_0(\vec{k}) \equiv \frac{1}{2} \left(D_T k^2 + \sigma_3 k^2 - \frac{\Omega^2 K_I k^2}{\rho_0 \sigma_3} \right) \quad (4.140)$$

y

$$\Lambda_0(\vec{k}) \equiv \frac{1}{2} \sqrt{4D_T \sigma_3 k^4 \left(1 - \frac{R}{R_c}\right) - \left(D_T k^2 + \sigma_3 k^2 - \frac{\Omega^2 K_I k^2}{\rho_0 \sigma_3}\right)^2}. \quad (4.141)$$

Si consideramos los órdenes de magnitud de las cantidades involucradas y valores típicos de k en experimentos de dispersión de luz, $D_T k^2 \sim 10^7$, $\sigma_3 k^2 \sim 10^8$ y $\frac{\Omega^2 K_I k^4}{\rho_0} \sim 10^{14}$, entonces de (4.137) se desprende que $R_0 \cong -10^1$ y, en consecuencia, los modos visco-calóricos, ecuaciones (4.138) y (4.139), serán propagativos cuando $R/R_c \lesssim -10^1$. Esta situación corresponde a la región de propagación indicada en la Figura 4.2. La tasa de decaimiento λ_5 , ecuación (4.135), continua siendo real.

Resulta pertinente enfatizar que este caso corresponde a estados sobre-estabilizados, donde de las tres tasas de decaimiento, dos son modos propagativos visco-calóricos y la otra es completamente difusiva. De acuerdo con la ecuación (4.136), esto ocurre si la α contenida en X cambia su signo y se incrementa en varios órdenes de magnitud, situación que puede conseguirse al invertir la dirección en la cual se aplica el gradiente de temperatura, es decir, cuando se calienta desde abajo y se aumenta su intensidad. Hasta donde sabemos, no se cuenta con un análisis teórico ni con evidencia experimental de la existencia de modos de propagación

visco-calóricos en cristales líquidos nemáticos bajo la presencia de un gradiente de temperatura y un campo gravitacional uniforme. Dado que en fluidos simples, bajo estas condiciones, se tienen estudios analíticos [62], [63], [64] y experimentales [133] que reportan la presencia de modos propagativos visco-calóricos, esta predicción sugiere que tendría sentido diseñar experimentos para corroborar este fenómeno en nemáticos.

Modos puramente difusivos Cuando $R_0 \leq R(\vec{k})/R_c \leq 1$, los dos modos visco-calóricos preservan la misma forma que en la ecuación (4.134) y el otro permanece idéntico a la ecuación (4.135). Todos ellos son reales y completamente difusivos. En este régimen los siguientes casos son de especial interés. Por ejemplo, si $R(\vec{k})/R_c = R_0$, entonces los modos visco-calóricos (4.134) alcanzan el mismo valor, y consecuentemente, las tres tasas de decaimiento son

$$\lambda_{3,4} = \frac{1}{2} \left(D_T k^2 + \sigma_3 k^2 - \frac{\Omega^2 K_I k^2}{\rho_0 \sigma_3} \right), \quad (4.142)$$

y

$$\lambda_5 = \frac{K_I k^2}{\gamma_1} + \frac{\Omega^2 K_I k^2}{\rho_0 \sigma_3}. \quad (4.143)$$

Estos modos visco-calóricos se indican en el vértice de la parábola en la Figura 4.2.

Por otra parte, si la capa nemática está en un estado de equilibrio termodinámico homogéneo, $g = 0$ y $\alpha = 0$, entonces $X = 0$ y $R(\vec{k})/R_c = 0$, de manera que las expresiones correspondientes de los modos difusivos térmico, de cizalla y del director en este estado de equilibrio (identificado por el superíndice e) son

$$\lambda_3^e = D_T k^2, \quad (4.144)$$

$$\lambda_4^e = \sigma_3 k^2 - \frac{\Omega^2 K_I k^2}{\rho_0 \sigma_3} \quad (4.145)$$

y

$$\lambda_5^e = \frac{K_I k^2}{\gamma_1} + \frac{\Omega^2 K_I k^2}{\rho_0 \sigma_3}. \quad (4.146)$$

Estas tasas de decaimiento son bien conocidas en la literatura, [3], [44], [52]. λ_3^e y λ_4^e son mostradas en la parte media de la Figura 4.2.

Dado que para nemáticos $\sigma_3 - \frac{\Omega^2 K_I}{\rho_0 \sigma_3}$ usualmente es más grande que D_T , puede verse de la ecuación (4.134) que, conforme $R(\vec{k})/R_c$ crece y se aproxima a 1, la magnitud del modo difusivo térmico decrece, mientras que el modo de cizalla crece. Al inicio del régimen convectivo, $R(\vec{k})/R_c = 1$, esto es, cuando R alcanza su valor crítico R_c y los dos modos visco-calóricos (4.134) se simplifican como

$$\lambda_3 = 0, \quad (4.147)$$

$$\lambda_4 = D_T k^2 + \sigma_3 k^2 - \frac{\Omega^2 K_I k^2}{\rho_0 \sigma_3}, \quad (4.148)$$

mientras que el tercero es

$$\lambda_5 = \frac{K_I k^2}{\gamma_1} + \frac{\Omega^2 K_I k^2}{\rho_0 \sigma_3}. \quad (4.149)$$

Este comportamiento para las tasas de decaimiento λ_3 y λ_4 se ilustra en la Figura 4.2.

4.3.2. Modos transversales

Los modos hidrodinámicos transversales son las raíces del polinomio cuadrático $p^T(\lambda)$ de la matriz de coeficientes N^T del sistema de ecuaciones estocástico lineal para las variables transversales (4.100). Estas raíces se calculan a continuación.

4.3.2.1. Modos transversales de cizalla y del director

De acuerdo con lo anterior, los modos transversales de cizalla y del director son las raíces de $p^T(\lambda) = 0$, es decir,

$$\lambda^2 - \left(\sigma_4 k^2 + \frac{K_{II} k^2}{\gamma_1} \right) \lambda + \sigma_4 k^2 \frac{K_{II} k^2}{\gamma_1} + \frac{\lambda_+^2 K_{II} k^2 k_z^2}{\rho_0} = 0. \quad (4.150)$$

Siendo nuevamente el método aproximativo de pequeñas cantidades usado previamente, pueden ser identificadas en la ecuación (4.150) las cantidades $\sigma_4 k^2$, $K_{II} k^2 / \gamma_1$ y $\lambda_+^2 K_{II} k^2 k_z^2 / \rho_0$. Definimos las cantidades adimensionales pequeñas o reducidas transversales

$$a_4 \equiv \frac{\sigma_4 k^2}{\bar{\omega}}, \quad a'_5 \equiv \frac{K_{II} k^2}{\gamma_1 \bar{\omega}}, \quad a'_6 \equiv \frac{\lambda_+^2 K_{II} k^2 k_z^2}{\rho_0 \bar{\omega}^2}, \quad (4.151)$$

en donde otra vez $\bar{\omega} \equiv c_s k$. Dado que para nemáticos típicos λ_+ es del orden de la unidad, que $\gamma_1 \sim 10^{-1} g / (cm \ s)$, $\sigma_4 \sim 10^{-2}$, $K_{II} \sim 10^{-6}$ [46], y además al tomar en consideración que $c_s \sim 10^5 cm/s$, $k \sim 10^5 cm^{-1}$, $g \sim 10^3 cm/s^2$, las cantidades a_4 , a'_5 y a'_6 poseen los órdenes de magnitud $a_4 \sim 10^{-2}$, $a'_5 \sim 10^{-5}$ y $a'_6 \sim 10^{-6}$. Por consiguiente, al reescribir (4.150) en términos de la variable $\bar{s} \equiv \lambda / \bar{\omega}$ y las cantidades pequeñas (4.151), resulta equivalente a la ecuación $p^T(\bar{s}) = 0$, esto es

$$\bar{s}^2 + A'_1 \bar{s} + A'_2 = 0, \quad (4.152)$$

en donde $p^T(\bar{s}) \equiv p^T(\lambda) / \bar{\omega}^2$, y

$$A'_1 \equiv -a_4 - a'_5, \quad (4.153)$$

$$A'_2 \equiv a_4 a'_5 + a'_6. \quad (4.154)$$

Las soluciones de la ecuación (4.152) son

$$\bar{s}'_+ = -\frac{1}{2} A'_1 + \frac{1}{2} \sqrt{\Delta''}, \quad (4.155)$$

$$\bar{s}'_- = -\frac{1}{2} A'_1 - \frac{1}{2} \sqrt{\Delta''}, \quad (4.156)$$

en las cuales el discriminante está dado por

$$\Delta'' \equiv (A'_1)^2 - 4A'_2. \quad (4.157)$$

De acuerdo con los órdenes de magnitud de las cantidades reducidas, el discriminante de la ecuación (4.157) puede ser simplificado como $\Delta' \simeq a_4^2 - 2a_4 a'_5 > 0$, lo cual implica que siempre $\Delta'' > 0$. Consecuentemente, las soluciones (4.155) y (4.156) son reales y distintas, a saber,

$$\bar{s}'_+ \simeq a_4 - \frac{a'_6}{a_4}, \quad (4.158)$$

$$\bar{s}'_- \simeq a'_5 + \frac{a'_6}{a_4}. \quad (4.159)$$

Como antes, éstas pueden ser reescribirse como

$$\lambda_6 = \sigma_4 k^2 - \frac{\lambda_+^2 K_{II} k_z^2}{\rho_0 \sigma_4}, \quad (4.160)$$

$$\lambda_7 = \frac{K_{II} k^2}{\gamma_1} + \frac{\lambda_+^2 K_{II} k_z^2}{\rho_0 \sigma_4}. \quad (4.161)$$

Debe observarse que estos modos difusivos transversales de cizalla y del director, ecuaciones (4.160) y (4.161), coinciden completamente con los ya reportados para nemáticos [3], [46], [52].

4.4. Modos de un nemático en equilibrio y un fluido simple en un sistema de Rayleigh-Bénard

A partir de los modos hidrodinámicos calculados para un nemático en un sistema de Rayleigh-Bénard, resulta posible obtener, como casos límite, los correspondientes modos de un nemático en el estado de equilibrio y un fluido simple en ese mismo régimen de no equilibrio. Ambas situaciones se discuten a continuación.

4.4.1. Nemático en el estado de equilibrio

Se ha encontrado que para un nemático en un sistema de Rayleigh-Bénard, el efecto de los gradientes externos α y g sólo se manifiesta en el acoplamiento de los modos longitudinales difusivo térmico y de cizalla, lo cual da lugar a los modos visco-calóricos $\lambda_{3,4}$ señalados en las expresiones (4.134). En el estado de equilibrio, es decir, cuando α y g son nulas, éstos se reducen en los modos λ_3^e y λ_4^e indicados, respectivamente, por (4.144) y (4.145); en tanto que los demás modos deducidos, en este estado, permanecen sin cambio alguno. Por consiguiente, los modos hidrodinámicos de un nemático, en el estado de equilibrio (denotado con el supeíndice e), están integrados por cinco modos longitudinales: los dos propagativos acústicos

$$\lambda_1^e \simeq \Gamma k^2 + i c_s k, \quad (4.162)$$

$$\lambda_2^e \simeq \Gamma k^2 - i c_s k, \quad (4.163)$$

dados por (4.118) y (4.119), así como los tres difusivos

$$\lambda_3^e = D_T k^2, \quad (4.164)$$

$$\lambda_4^e = \sigma_3 k^2 - \frac{\Omega^2 K_I k^2}{\rho_0 \sigma_3}, \quad (4.165)$$

$$\lambda_5^e = \frac{K_I k^2}{\gamma_1} + \frac{\Omega^2 K_I k^2}{\rho_0 \sigma_3}. \quad (4.166)$$

idénticos a los (4.144)-(4.146). Además, de los dos transversales

$$\lambda_6^e = \sigma_4 k^2 - \frac{\lambda_+^2 K_{II} k_z^2}{\rho_0 \sigma_4}, \quad (4.167)$$

$$\lambda_7^e = \frac{K_{II} k^2}{\gamma_1} + \frac{\lambda_+^2 K_{II} k_z^2}{\rho_0 \sigma_4}, \quad (4.168)$$

indicados por (4.160) y (4.161). Estos modos son bien conocidos y han sido ya reportados en la literatura, [3], [44], [52]

4.4.2. Fluido simple en un sistema de Rayleigh-Bénard

Si se considera el límite isotrópico del fluido simple, pueden obtenerse los correspondientes modos hidrodinámicos cuando éste se encuentra en un sistema de Rayleigh-Bénard. Con esta finalidad, sólo basta hacer las identificaciones discutidas en la Subsección 4.2.5. Así, de acuerdo con (4.118) y (4.119), un fluido simple cuenta con los modos longitudes acústicos

$$\lambda_1 \simeq \Gamma' k^2 + i c_s k, \quad (4.169)$$

$$\lambda_2 \simeq \Gamma' k^2 - i c_s k, \quad (4.170)$$

en donde c_s es la velocidad adiabática del sonido en se medio y $\Gamma' \equiv \frac{1}{2} \left[(\gamma - 1) \chi + \frac{1}{\rho_0} \left(\frac{4}{3} \eta + \xi \right) \right]$ su correspondiente coeficiente de atenuación del sonido. Por otra parte, de acuerdo con (4.134) y (4.135) los modos longitudinales visco-calóricos son

$$\lambda_{3,4} \simeq \frac{1}{2} (\chi + \nu) k^2 \mp \frac{1}{2} \sqrt{(\chi + \nu)^2 k^4 - 4 \chi \nu k^4 \left(1 - \frac{R}{R_c} \right)}. \quad (4.171)$$

En el límite isotrópico del fluido simple $\lambda_5 = \lambda_7 = 0$, de manera que el único modo transversal de esta sustancia en un sistema de Rayleigh-Bénard es

$$\lambda_6 = \nu k^2. \quad (4.172)$$

En (4.171) el cociente R/R_c se define como

$$\frac{R(\vec{k})}{R_c} \equiv -\frac{g \beta X \widehat{k}_1^2}{\chi \nu k^4}. \quad (4.173)$$

Los modos (4.169)-(4.172) están en completa concordancia con los calculados analíticamente en las referencias [62], [63], [64].

4.4.2.1. Valores de $R(\vec{k})/R_c$

Los dos modos visco-calóricos (4.171), de foma similar al nemático, podrían ser propagativos o difusivos. Estas características, desde luego, depende de los valores asumidos por el cociente $R(\vec{k})/R_c$. Para fluidos simples, han sido predichas teóricamente y corroboradas experimentalmente.

Modos propagativos Si $R(\vec{k})/R_c < R_0$, en donde $R_0 \equiv -(\nu - \chi)^2 / (4\chi\nu) < 0$, los modos visco-calóricos (4.171) serán propagativos. De acuerdo con (4.173), esto ocurre si la α contenida en X cambia su signo y se incrementa en varios órdenes de magnitud, situación que se consigue al invertir el gradiente de temperatura (cuando se calienta desde abajo y se aumenta su intensidad). Se cuenta con estudios analíticos [62], [63], [64] y experimentales [133] que reportan, para fluidos simples en estas condiciones, la presencia de modos propagativos visco-calóricos.

Modos puramente difusivos Cuando $R_0 \leq R(\vec{k})/R_c \leq 1$, los modos visco-calóricos preservan la forma (4.171), son reales y completamente difusivos. En este régimen, nuevamente son tres los casos de especial interés. Si $R(\vec{k})/R_c = R_0$, entonces ambos modos visco-calóricos (4.171) son idénticos e iguales a

$$\lambda_{3,4} = \frac{1}{2}(\chi + \nu)k^2. \quad (4.174)$$

Por otra parte, si el fluido simple se encuentra en un estado de equilibrio termodinámico homogéneo, $g = 0$ y $\alpha = 0$, por lo que $X = 0$ y $R(\vec{k})/R_c = 0$; en consecuencia, en este estado de equilibrio (identificado por el superíndice e) se tiene el modo difusivo térmico

$$\lambda_3^e = \chi k^2 \quad (4.175)$$

y el de cizalla

$$\lambda_4^e = \nu k^2. \quad (4.176)$$

Estas tasas de decaimiento son bien conocidas en la literatura, [62], [63], [64]. Finalmente, debido a que en un fluido simple comúnmente ν es mayor que χ , de acuerdo con (4.171), conforme $R(\vec{k})/R_c$ crece y se aproxima a 1, la magnitud del modo difusivo térmico decrece, mientras que el modo de cizalla crece. En el umbral del régimen convectivo (cuando R alcanza su valor crítico R_c), $R(\vec{k})/R_c = 1$ y los dos modos visco-calóricos (4.171) adquieren los valores

$$\lambda_3 = 0 \quad (4.177)$$

y

$$\lambda_4 = (\chi + \nu)k^2. \quad (4.178)$$

Estos tres casos concuerdan con los obtenidos en estudios analíticos ya reportados para fluidos simples que se encuentran en este régimen [62], [63], [64]. Su comportamiento gráfico, que es similar al que se ilustra en la Figura 4.2, puede verse en la Figura 1 de la referencia [62].

Resumiendo, en este capítulo se han calculado los siete modos hidrodinámicos de un cristal líquido nemático en un sistema de Rayleigh-Bénard, los cuales consisten en cinco modos longitudinales: los dos acústicos (4.118) y (4.119), los dos visco-calóricos (4.134) y el del director (4.135); dos transversales, dados por (4.160) y (4.161). El efecto de los gradientes externos α y g se manifiesta sólo en los modos longitudinales; específicamente, en el par visco-calórico, que es resultado, debido a la presencia de estos gradientes, del acoplamiento

de los modos difusivo térmico y del director. Se mostró que todos estos modos nemáticos coinciden con los correspondientes modos reportados en los casos límite de un nemático en equilibrio termodinámico, modos (4.162)-(4.168), y de un fluido simple en un sistema de Rayleigh-Bénard, modos (4.169)-(4.172). Estos casos límite son bien conocidos en la literatura: han sido predichos teóricamente y verificados experimentalmente.

Sin embargo, es importante señalar que nuestras tasas de decaimiento nemáticas longitudinales visco-calóricas $\lambda_{3,4}$ y del director λ_5 , dadas, respectivamente, por las expresiones (4.134) y (4.135), no concuerdan con las correspondientes reportadas en la literatura [65], [66]. En estos trabajos, se reportan un modo para el director, otro que resulta de la combinación de los modos difusivo térmico y del director, y uno más de cizalla. Si bien con estos modos podrían, en principio, recuperarse los correspondientes modos en los límites de un nemático y fluido simple ambos en el estado de equilibrio termodinámico, es en el régimen de Rayleigh-Bénard descrito para este último en donde fallan. En efecto, a partir de ellos no puede recuperarse la expresión para los modos visco-calóricos de un fluido simple dada por la ecuación (4.171).

Además, para un nemático en un sistema de Rayleigh-Bénard, cuando sus modos son reales y puramente difusivos y $R(\vec{k})/R_c = R_0$, las referencias [65], [66] predicen que el modo del director tiende a cero, el modo de cizalla no cambia y hay un modo adicional que es la suma de los modos térmico y del director. En contraste nuestros modos $\lambda_{3,4}$ y λ_5 , dados respectivamente por (4.134) y (4.135), sugieren que λ_3 se anula, λ_4 es la suma de los modos difusivos térmico y de cizalla, y λ_5 virtualmente no cambia, tal como lo indican las expresiones (4.147)-(4.149). Más aún, si consideramos el límite del fluido simple en esta misma situación, dichas referencias predicen la existencia de un modo difusivo térmico y otro de cizalla, los cuales no coinciden con los reportados en la literatura: uno cero y otro debido a las contribuciones de los modos térmico y de cizalla, ambos dados, respectivamente, por las expresiones (4.177) y (4.178). En otras palabras, nuestros resultados se reducen a los correspondientes para un fluido simple conforme R alcanza su valor crítico R_c . Debido a que en un fluido simple, estas características han sido predichas teóricamente, nuestros resultados sugieren que podría ser factible verificarlos experimentalmente también para nemáticos, [62], [63], [64].

Capítulo 5

Espectro de dispersión de luz de un nemático bajo un gradiente de temperatura uniforme y un campo gravitatorio constante externo

5.1. Introducción

Emplearemos los resultados de los dos últimos capítulos para calcular el espectro de dispersión de Rayleigh de un nemático en un estado estacionario de no equilibrio, determinado por la presencia de un gradiente de temperatura uniforme y un campo gravitatorio constante, es decir, en un sistema de Rayleigh-Bénard. En nuestro análisis continuaremos considerando sólo el régimen no-convectivo. La idea subyacente de este enfoque es examinar el decaimiento de las fluctuaciones orientacionales de este líquido que surgen de su acoplamiento con las fluctuaciones de las demás variables de estado hidrodinámicas. Este acoplamiento modificará la distribución espectral de la luz debido a la presencia de nuevos modos, como se discutió en el Capítulo 4.

El cálculo del factor de estructura dinámico conduce a un espectro de Rayleigh modificado. La fuerza termodinámica disipativa (gradiente de temperatura) produce una modificación que se manifiesta por un aumento de la intensidad de la línea de Rayleigh que varía como k^{-4} con el número de onda k de las fluctuaciones. Esta línea de Rayleigh consta de tres lorentzianas centrales: una de mayor altura determinada por las fluctuaciones del director y dos más de igual altura producidas por los modos visco-calóricos debidos al acoplamiento entre la entropía y las fluctuaciones del director. Este es un efecto puramente de no equilibrio que persiste aun cuando el gradiente de temperatura está ausente, pero que desaparece si la gravedad se

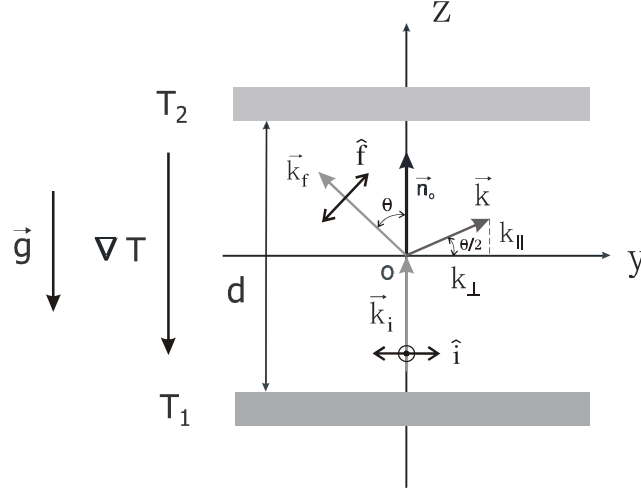


Figura 5.1: Representación esquemática de una celda líquido cristalina plana de configuración homeótropa en presencia de un campo gravitacional constante \vec{g} y un gradiente de temperatura externo ∇T producido por la diferencia de temperaturas ($T_1 > T_2$) entre las placas. \vec{k}_i es el vector de onda de la luz incidente y \vec{k}_f el vector de onda de la luz dispersada, $\vec{k} = \vec{k}_i - \vec{k}_f$ es el vector de onda de dispersión y θ es el ángulo de dispersión. k_\perp y k_\parallel son, respectivamente, las componentes de \vec{k} perpendicular y paralela a \vec{n}_0 . Además, \hat{i} y \hat{f} son, respectivamente, las polarizaciones de los haces incidente y dispersado.

anula. Encontramos que conforme el ángulo de dispersión disminuye, las dos lorentzianas de menor tamaño se desplazan simétricamente con respecto a ésta y aumentan su altura. Encontramos que los tres picos contienen las alas de Rayleigh debidas a las fluctuaciones orientacionales de las moléculas anisótropas [93]. También se muestra que el espectro obtenido se reduce a los correspondientes de un nemático en el estado de equilibrio y de un fluido simple en los límites apropiados.

5.2. Factor de estructura dinámico

Calcularemos el espectro de dispersión de Rayleigh para el modelo considerado en el Capítulo 4, que consiste de una capa nemática de configuración inicial homeótropa confinada entre dos placas paralelas horizontales en presencia del campo gravitatorio constante $\vec{g} = -g\hat{z}$ y bajo la acción del gradiente de temperatura efectivo $X \equiv -\alpha + g\beta T_0/c_p$. Esta composición corresponde a la de un sistema de Rayleigh-Bénard y su análisis se efectuará sólo para el régimen no-convectivo.

Con el propósito de encontrar el espectro de Rayleigh, se calculará la función de autocorrelación de las fluctuaciones de la densidad de entropía δs promediada en el estado estacionario [62]. En la definición (4.88) del Capítulo 4 dada para las variables de la misma dimensión z_i (con $i = 1, \dots, 7$), se vinculó a la transformada espacial de Fourier de las fluctuaciones de la densidad de entropía, $\tilde{\delta s}$, con de la variable de la misma dimensión z_3 . Esta última está acoplada con las variables z_4 y z_5 , y juntas determinan el vector

longitudinal $\vec{Z}_Y^L = (z_3, z_4, z_5)^\dagger$ cuya evolución temporal está gobernada por el sistema de ecuaciones (4.103)

$$\frac{\partial}{\partial t} \vec{Z}_Y^L(\vec{k}, t) = -N_{YY}^L \vec{Z}_Y^L(\vec{k}, t) + \vec{\Xi}_Y^L(\vec{k}, t).$$

Al tomar en consideración la matriz de coeficientes N_{YY}^L dada por (4.105) y el vector de ruidos $\vec{\Xi}_Y^L(\vec{k}, t) = (\zeta_3, \zeta_4, \zeta_5)^\dagger$, este sistema se escribe explícitamente como

$$\frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} z_3 \\ z_4 \\ z_5 \end{pmatrix} = - \begin{pmatrix} D_T k^2 & \frac{\beta X c_s}{(\gamma-1)^{1/2}} & \frac{\alpha \beta \chi_a}{(\gamma-1)^{1/2}} k \\ -(\gamma-1)^{1/2} \frac{g}{c_s} \frac{k^2}{k^2} & \sigma_3 k^2 & -\frac{\Omega K_L}{\rho_0 c_s} k^3 \\ 0 & \Omega c_s k & \frac{K_L}{\gamma_1} k^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} z_3 \\ z_4 \\ z_5 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \zeta_3 \\ \zeta_4 \\ \zeta_5 \end{pmatrix}. \quad (5.1)$$

Recordemos que $\gamma \equiv c_p/c_v = c_s^2/c_T^2$, en donde c_v es el calor específico a volumen constante, siendo c_s y c_T , respectivamente, las velocidades adiabática e isotérmica del sonido. Además, $\chi_a \equiv \chi_{\parallel} - \chi_{\perp}$ denota la difusividad térmica anisótropa siendo, respectivamente, χ_{\perp} y χ_{\parallel} sus componentes perpendicular y paralela al campo director, y γ_1 es un coeficiente de viscosidad torsional [46]. Las cantidades D_T , σ_3 , K_L , Ω presentes en (5.1) dependen de las propiedades materiales del nemático y están definidas en el Capítulo 4, respectivamente, por las expresiones (4.72), (4.75), (4.77) y (4.79). Los ruidos ζ_3 , ζ_4 y ζ_5 están definidos por medio de las expresiones (A.3) a (A.5) indicadas en el Apéndice A.

Si se aplica la transformada de Fourier, con respecto t , al sistema (5.1) se obtiene el sistema de ecuaciones algebraico (C.1) dado en el Apéndice C. Allí mismo se muestran las soluciones z_3 , z_4 y z_5 de dicho sistema escritas en términos de los ruidos ζ_3 , ζ_4 y ζ_5 , así como de los correspondientes modos hidrodinámicos λ_3 , λ_4 y λ_5 hallados en el Capítulo 4. En el Apéndice C también se encuentran las funciones de autocorrelación de z_3 y z_5 , así como las de correlación cruzada entre z_3 y z_5 que, como se mostrará más adelante, son las que se están involucradas en el cálculo del espectro de dispersión de luz de Rayleigh en este estado estacionario de no equilibrio.

Supondremos que la densidad espectral de las fluctuaciones del tensor dieléctrico (3.11)

$$I_{if}^{\epsilon}(\vec{k}, \omega) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \langle \delta\epsilon_{if}(\vec{k}, t) \delta\epsilon_{if}^*(\vec{k}, 0) \rangle \exp(-i\omega t) dt \quad (5.2)$$

y la transformada de Fourier espacial $\delta\epsilon_{if}(\vec{k}, t)$ de la componente para las polarizaciones inicial \hat{i} y final \hat{f} de las fluctuaciones del tensor dieléctrico nemático (3.19)

$$\begin{aligned} \delta\epsilon_{if}(\vec{r}, t) &= \hat{i} \cdot \hat{f} \delta\epsilon_{\perp}(\vec{r}, t) + i_0 f_0 \delta\epsilon_a(\vec{r}, t) \\ &+ \epsilon_a(\vec{r}, t) \sum_{\alpha=1,2} (i_{\alpha} f_0 + i_0 f_{\alpha}) \delta n_{\alpha}(\vec{r}, t), \end{aligned} \quad (5.3)$$

definidas ambas en el Capítulo 4, siguen siendo válidas en el estado estacionario de no equilibrio bajo consideración. En esta situación, los paréntesis angulares $\langle \dots \rangle$ en la ecuación (5.2) denotan el promedio térmico en el estado estacionario. Recuérdese que en (5.3), $i_0 \equiv \hat{i} \cdot \vec{n}_0$, $f_0 \equiv \hat{f} \cdot \vec{n}_0$, $i_{\alpha} \equiv \hat{e}_{\alpha} \cdot \hat{i}$, $f_{\alpha} \equiv \hat{e}_{\alpha} \cdot \hat{f}$; además $\delta\vec{n} = \delta n_1 \hat{e}_1 + \delta n_2 \hat{e}_2$, con $\hat{e}_2 \equiv (\vec{n}_0 \times \vec{k}) k_{\perp}^{-1}$ y $\hat{e}_1 \equiv \hat{e}_2 \times \vec{n}_0$.

También supondremos, como se hace en el estado de equilibrio [12], que en este estado estacionario de no equilibrio los coeficientes dieléctricos $\epsilon_{\parallel}^{st}$ y ϵ_{\perp}^{st} (recuérdese que $\epsilon_a \equiv \epsilon_{\parallel} - \epsilon_{\perp}$) son, en general, funciones de

la densidad ρ^{st} y la temperatura T^{st} . Esta consideración nos permite escribir las ecuaciones dieléctricas del cristal líquido nemático con las cuales, bajo la hipótesis de equilibrio local, puede escribirse a las desviaciones de estas componentes dieléctricas en términos de las desviaciones de la densidad y la temperatura, es decir, $\delta\epsilon_{\parallel} = \delta\epsilon_{\parallel}(\delta\rho, \delta T)$ y $\delta\epsilon_{\perp} = \delta\epsilon_{\perp}(\delta\rho, \delta T)$. (Véase el Apéndice D). En ese mismo apartado se muestra que al escribir, vía relaciones termodinámicas, a $\delta\rho$ y δT en términos de las desviaciones de la entropía δs y la presión δp , y que al considerar a ambas componentes dieléctricas funciones bastante débiles de la temperatura, la relación (5.3) puede reescribirse como

$$\begin{aligned}
I_{if}^{\epsilon}(\vec{k}, \omega) &= \left(\frac{\gamma - 1}{\gamma} \frac{T_0 \kappa_T \rho_0^3}{c_p} \right) \left[(\hat{i} \cdot \hat{f}) \left(\frac{\partial \epsilon_{\perp}}{\partial \rho} \right)_T + i_0 f_0 \left(\frac{\partial \epsilon_a}{\partial \rho} \right)_T \right]^2 S_{ss}(\vec{k}, \omega) \\
&- \epsilon_a \left(\frac{\gamma - 1}{\gamma} \frac{T_0 \kappa_T \rho_0^3}{c_p} \right)^{1/2} \left[(\hat{i} \cdot \hat{f}) \left(\frac{\partial \epsilon_{\perp}}{\partial \rho} \right)_T + i_0 f_0 \left(\frac{\partial \epsilon_a}{\partial \rho} \right)_T \right] \sum_{\beta=1,2} (i_0 f_{\beta} + f_0 i_{\beta}) S_{sn_{\beta}}(\vec{k}, \omega) \\
&- \epsilon_a \left(\frac{\gamma - 1}{\gamma} \frac{T_0 \kappa_T \rho_0^3}{c_p} \right)^{1/2} \left[(\hat{i} \cdot \hat{f}) \left(\frac{\partial \epsilon_{\perp}}{\partial \rho} \right)_T + i_0 f_0 \left(\frac{\partial \epsilon_a}{\partial \rho} \right)_T \right] \sum_{\alpha=1,2} (i_0 f_{\alpha} + f_0 i_{\alpha}) S_{n_{\alpha}s}(\vec{k}, \omega) \\
&+ \epsilon_a^2 \sum_{\alpha=1,2} (i_0 f_{\alpha} + f_0 i_{\alpha}) \sum_{\beta=1,2} (i_0 f_{\beta} + f_0 i_{\beta}) S_{n_{\alpha}n_{\beta}}(\vec{k}, \omega), \tag{5.4}
\end{aligned}$$

en donde las derivadas son encontradas experimentalmente a partir de las variaciones de ϵ_{\perp} and ϵ_a con la densidad para el nemático en el estado de equilibrio. En la deducción de (5.4), $S_{ss}(\vec{k}, \omega)$, $S_{n_{\alpha}s}(\vec{k}, \omega)$, $S_{sn_{\beta}}(\vec{k}, \omega)$ y $S_{n_{\alpha}n_{\beta}}(\vec{k}, \omega)$ son, respectivamente, las densidades espectrales de las funciones de correlación $\langle \delta s(\vec{k}, t) \delta s^*(\vec{k}, 0) \rangle$, $\langle \delta n_{\alpha}(\vec{k}, t) \delta s^*(\vec{k}, 0) \rangle$, $\langle \delta s(\vec{k}, \omega) \delta n_{\beta}^*(\vec{k}, 0) \rangle$ y $\langle \delta n_{\alpha}(\vec{k}, t) \delta n_{\beta}^*(\vec{k}, 0) \rangle$; además, dado que en el espectro de Rayleigh las fluctuaciones de la presión δp son despreciables, se ha considerado que $S_{pp}(\vec{k}, \omega)$, $S_{ps}(\vec{k}, \omega)$, $S_{sp}(\vec{k}, \omega)$, $S_{n_{\alpha}p}(\vec{k}, \omega)$ y $S_{pn_{\beta}}(\vec{k}, \omega)$ son nulas (ver el Apéndice D). Obsérvese que si en el espectro (5.4) se remueve la presencia del director, esto es, si eliminamos la anisotropía debida al director o hacemos $\epsilon_a = 0$, se obtiene la expresión equivalente de la densidad espectral de un fluido simple dada por la ecuación (2.16), en la referencia [62]. Por otra parte, si en la ecuación (5.4) se consideran sólo las contribuciones debidas al director, es decir, que de todas las densidades espectrales de las funciones de autocorrelación y de correlación cruzadas únicamente $S_{n_{\alpha}n_{\beta}}(\vec{k}, \omega) \neq 0$, se obtiene el resultado ya reportado en las referencias [46], [47].

Lo que frecuentemente se mide en espectroscopía de dispersión de luz es la densidad espectral $I_{if}^{\epsilon}(\vec{k}, \omega)$ a un ángulo de dispersión dado (es decir, para una \vec{k} fija) como una función de ω . Debe notarse que $I_{if}^{\epsilon}(\vec{k}, \omega)$ es directamente proporcional al *factor de estructura dinámico* $S(\vec{k}, \omega)$ [62], y que la forma explícita de la constante de proporcionalidad es irrelevante debido a que en lo subsecuente trabajaremos sólo con factores de estructura dinámicos normalizados; en consecuencia, tal como se mencionó al final de la Subsección 3.2.3, identificaremos a la $I_{if}^{\epsilon}(\vec{k}, \omega)$ dada por la ecuación (5.4) con $S(\vec{k}, \omega)$.

5.2.1. Geometrías de dispersión nemáticas

Dado que la configuración inicial de la celda nemática es homeótropa, consideraremos dos geometrías de dispersión típicas, en las que \hat{n}_0 es paralelo a \vec{k}_i [87] y corresponden al arreglo mostrado en la Figura 5.1:

a) Configuración 1 (splay/bend), para polarizaciones de entrada y de salida en el plano de dispersión, y b) Configuración 2 (twist/bend), con polarización de entrada perpendicular al plano de dispersión y polarización de salida paralela al plano de dispersión. La primera geometría corresponde a la componente polarizada $H-H$, en tanto que la segunda equivale a la $V-H$ [12].

5.2.1.1. Geometría de dispersión $H-H$

Consideraremos primero la geometría $H-H$. En este caso $\hat{i} = \hat{e}_1$ y $\hat{f} = \cos\theta\hat{e}_1 + \text{sen}\theta\hat{z}$, por consiguiente, $\hat{i} \cdot \hat{f} = \cos\theta$, $i_0 \equiv 0$, $f_0 \equiv \text{sen}\theta$, $i_1 \equiv 1$, $i_2 \equiv 0$, $f_1 \equiv \cos\theta$, $f_2 \equiv 0$. De esta manera, si $\hat{e}_1 = \hat{y}$, $\hat{e}_2 = -\hat{x}$, donde \hat{x} , \hat{y} denotan a los vectores unitarios a lo largo de los ejes x , y , respectivamente, entonces la ecuación (5.4), como puede verse en el Apéndice D, se simplifica a

$$S(\vec{k}, \omega) = \cos^2\theta \left(\frac{\gamma - 1}{\gamma} \frac{T_0 \kappa_T \rho_0^3}{c_p} \right) \left(\frac{\partial \epsilon_{\perp}}{\partial \rho} \right)_T S_{ss}(\vec{k}, \omega) + \epsilon_a^2 \text{sen}^2\theta \frac{k_y^2}{k^4} S_{f_1 f_1}(\vec{k}, \omega) \\ + \epsilon_a \frac{ik_y}{k^2} \cos\theta \text{sen}\theta \left(\frac{\gamma - 1}{\gamma} \frac{T_0 \kappa_T \rho_0^3}{c_p} \right)^{1/2} \left(\frac{\partial \epsilon_{\perp}}{\partial \rho} \right)_T \left[S_{f_1 s}(\vec{k}, \omega) - S_{s f_1}(\vec{k}, \omega) \right]. \quad (5.5)$$

en donde $S_{ss}(\vec{k}, \omega)$, $S_{f_1 f_1}(\vec{k}, \omega)$, $S_{f_1 s}(\vec{k}, \omega)$ y $S_{s f_1}(\vec{k}, \omega)$ son, respectivamente, las densidades espectrales de las funciones de correlación $\langle \delta s(\vec{k}, t) \delta s^*(\vec{k}, 0) \rangle$, $\langle \delta f_1(\vec{k}, t) \delta f_1^*(\vec{k}, 0) \rangle$, $\langle \delta f_1(\vec{k}, t) \delta s^*(\vec{k}, 0) \rangle$ y $\langle \delta s(\vec{k}, t) \delta f_1^*(\vec{k}, 0) \rangle$, cuyas expresiones explícitas están dadas en el Apéndice C por las ecuaciones (C.19), (C.28), (C.46) y (C.47). Mediante estas ecuaciones se obtiene, tal como se muestra en el Apéndice D, el espectro (D.21)

$$S(\vec{k}, \omega) = k_B T_0 \left[D_3(\vec{k}, \omega) \frac{2\lambda_3}{\omega^2 + \lambda_3^2} + D_4(\vec{k}, \omega) \frac{2\lambda_4}{\omega^2 + \lambda_4^2} \right. \\ \left. + D_5(\vec{k}, \omega) \frac{2\lambda_5}{\omega^2 + \lambda_5^2} \right], \quad (5.6)$$

cuya forma más general de los coeficientes $D_3(\vec{k}, \omega)$, $D_4(\vec{k}, \omega)$ y $D_5(\vec{k}, \omega)$ está dada, respectivamente, por las expresiones (D.25), (D.26) y (D.27). En (5.6), las tasas de decaimiento $\lambda_{3,4}$, λ_5 , son, respectivamente, los modos longitudinales visco-calóricos y del director

$$\lambda_{3,4} \simeq \frac{1}{2} \left(D_T k^2 + \sigma_3 k^2 - \frac{\Omega^2 K_I k^4}{\rho_0 \sigma_3 k^2} \right) \\ \mp \frac{1}{2} \sqrt{\left(D_T k^2 + \sigma_3 k^2 - \frac{\Omega^2 K_I k^4}{\rho_0 \sigma_3 k^2} \right)^2 - 4 D_T k^2 \sigma_3 k^2 \left(1 - \frac{R}{R_c} \right)}, \quad (5.7)$$

$$\lambda_5 \simeq \frac{K_I k^2}{\gamma_1} + \frac{\Omega^2 K_I k^4}{\rho_0 \sigma_3 k^2}, \quad (5.8)$$

conforme a (4.134) y (4.135) indicadas en el Capítulo 4, y en donde en (5.7) el cociente $R(k)/R_c$ es

$$\frac{R(k)}{R_c} \equiv -\frac{g\beta\hat{k}_{\perp}^2}{D_T \sigma_3 k^4} \left[X + \frac{\alpha\Omega\chi_a}{D_T \sigma_3} (\sigma_3 + D_T) \right], \quad (5.9)$$

de acuerdo con (4.136). La naturaleza de estos modos acoplados puede ser difusiva o propagativa, tal como fue discutido con anterioridad.

Supondremos que los ángulos de dispersión θ son rasantes, es decir, que $\theta \lesssim 1$, lo cual es usual en experimentos típicos de dispersión de luz [12], [61]. Bajo este supuesto, los coeficientes $D_3(\vec{k}, \omega)$, $D_4(\vec{k}, \omega)$ y $D_5(\vec{k}, \omega)$ de (5.6) se simplifican en los dados por las expresiones (D.28)-(D.30). Por consiguiente, en lo sucesivo, consideraremos como el factor de estructura, $S(\vec{k}, \omega)$, para la geometría $H-H$, al determinado por la ecuación (5.6), pero con los coeficientes $D_3(\vec{k}, \omega)$, $D_4(\vec{k}, \omega)$ y $D_5(\vec{k}, \omega)$ dados por (D.28)-(D.30). Es importante mencionar que, en esta situación, el factor de estructura (5.6) está constituido a lo más por tres funciones lorentzianas las cuales determinan completamente el espectro de Rayleigh en el estado estacionario de no equilibrio considerado.

5.2.1.2. Geometría de dispersión $V-H$

Por último, respecto a la geometría $V-H$, mencionaremos sólo algunas cuestiones generales. De acuerdo con la Figura 5.1, si $\hat{i} = -\hat{e}_2$ y $\hat{f} = \cos\theta\hat{e}_1 + \text{sen}\theta\hat{z}$, entonces $\hat{i} \cdot \hat{f} = 0$, $i_0 \equiv 0$, $f_0 \equiv \text{sen}\theta$, $i_1 \equiv 0$, $f_1 \equiv \cos\theta$, $i_2 \equiv -1$, $f_2 \equiv 0$. Así, si $\hat{e}_1 = \hat{y}$, $\hat{e}_2 = -\hat{x}$, entonces la ecuación (5.4) da lugar a la ecuación (D.45), en donde $I_{if}^{\xi}(\vec{k}, \omega)$ es proporcional a $S_{f_2 f_2}(\vec{k}, \omega)$, la densidad espectral de la función de correlación $\langle \delta f_2(\vec{k}, t) \delta f_2^*(\vec{k}, 0) \rangle$ (ver el Apéndice D). Las fluctuaciones δf_2 están dadas en términos de z_7 (ver las definiciones (4.88)), la cual es una de las variables transversales $\vec{Z}^T(\vec{k}, t) = (z_6, z_7)^\dagger$ dada por la expresión (4.92) del Capítulo 4. Como el vector $\vec{Z}^T(\vec{k}, t)$ es independiente de \vec{Z}_Y^L , las ecuaciones que gobiernan al conjunto de variables $\{z_6, z_7\}$ están desacopladas respecto del sistema (5.1).

En este trabajo centraremos nuestro análisis del espectro de Rayleigh sólo en el conjunto \vec{Z}_Y^L , debido a que el espectro correspondiente determinado por las variables transversales $\{z_6, z_7\}$ ya se ha discutido en las referencias [56], [134].

5.3. Fluctuaciones y valores de $R(\vec{k})/R_c$

De acuerdo con el valor de $R(\vec{k})/R_c$, las tasas de decaimiento (5.7) y (5.8) presentan algunos casos de interés, los cuales ya han sido discutidos con detalle. A continuación retomaremos estos casos y mostraremos la forma del espectro en cada uno de ellos.

5.3.1. Fluctuaciones propagativas y difusiva

De la expresión general para $\lambda_{3,4}$ dada por la ecuación (5.7), puede verse que las tasas de decaimiento visco-calóricas llegan a ser complejas conjugadas cuando $R(\vec{k})/R_c < R_0(\vec{k})$, en donde $R_0(\vec{k})$ está dada por (4.137) y siempre es negativa. La tasa de decaimiento restante λ_5 sigue siendo real e idéntica a (5.8). Esta solución corresponde a estados sobre-estabilizados en los que de las tres tasas de decaimiento, están presentes dos visco-calóricas propagativas, y la otra es completamente difusiva. En esta situación, las tasas de decaimiento visco-calóricas propagativas están dadas por las expresiones (4.138) y (4.139). Puede

mostrarse que la forma analítica del factor de estructura dinámico $S(\vec{k}, \omega)$ está dado como

$$S(\vec{k}, \omega) = k_B T_0 \rho_0^2 \kappa_T \left(\frac{\gamma - 1}{\gamma} \right) \left(\frac{\partial \epsilon_{\perp}}{\partial \rho} \right)_T \left[\frac{2F_1 \Omega_0}{(\omega + \Lambda_0)^2 + \Omega_0^2} + \frac{2G_1 \Omega_0}{(\omega - \Lambda_0)^2 + \Omega_0^2} + \frac{2H_1 \lambda_5}{\omega^2 + \lambda_5^2} + \frac{2F_2 \Omega_0 \omega}{(\omega + \Lambda_0)^2 + \Omega_0^2} + \frac{2G_2 \Omega_0 \omega}{(\omega - \Lambda_0)^2 + \Omega_0^2} \right], \quad (5.10)$$

en donde Ω_0 y Λ_0 están dadas, respectivamente, por (4.140) y (4.141), en tanto que los coeficientes F_1 , F_2 , G_1 , G_2 y H_1 corresponden, respectivamente, a las expresiones (D.37) a (D.41). (Ver el Apéndice D). Excepto por los dos últimos términos del lado derecho, $S(\vec{k}, \omega)$ es una suma de tres funciones lorentzianas. Las dos primeras representan un doblete determinado por dos líneas lorentzianas separadas simétricamente en $\omega = \pm \Lambda_0$ de amplitud cada una $2F_1/\Omega_0$ y $2G_1/\Omega_0$, respectivamente, y anchura a media altura $2\Omega_0$. El tercer término, está centrado en el origen con una amplitud $2H_1/\lambda_5$ y anchura a media altura $2\lambda_5$. Los dos últimos términos en la ecuación (5.10) representan una corrección no lorentziana que mueven al aparente doblete situado en $\omega = \pm \Lambda_0$, asimétricamente hacia el centro. Debe observarse que la ecuación (5.10) nos permitirá determinar exactamente los estados en los que los modos visco-calóricos propagativos están presentes. Estos dos últimos términos son menores que los tres primeros.

Si se considera el límite isótropo del fluido simple en un sistema de Rayleigh-Bénard, las tasas de decaimiento visco-calóricas propagativas cuentan con la misma forma que (4.138) y (4.139), con la excepción de que las cantidades Ω_0 y Λ_0 son más simples. El factor de estructura dinámico $S(\vec{k}, \omega)$ presenta una estructura similar a está (5.10), pero con coeficientes F_1 , F_2 , G_1 , G_2 y H_1 más simples. Sobre este fenómeno, pueden consultarse más detalles de su análisis y evidencia experimental, respectivamente, en las referencias [62] y [133].

5.3.2. Fluctuaciones puramente difusivas

Cuando $R_0 \left(\vec{k} \right) \leq R \left(\vec{k} \right) / R_c \leq 1$, los modos visco-calóricos λ_3 , λ_4 , preservan la misma forma que (5.7) y el otro λ_5 , permanece idéntico a (5.8). Todos ellos son reales y completamente difusivos. La forma general para el factor de estructura dinámico está dada por (5.6), con los coeficientes (D.28), (D.29) y (D.30), así como las tasas de decaimiento (5.7) y (5.8). Sin embargo, dichas expresiones pueden ser simplificadas en ciertas situaciones específicas que se señalan a continuación.

Primeramente, si $R \left(\vec{k} \right) / R_c = R_0 \left(\vec{k} \right)$, entonces los modos visco-calóricos alcanzan el mismo valor de modo que las tres tasas de decaimiento, de acuerdo con las expresiones (4.142) y (4.143), son $\lambda_{3,4} = \frac{1}{2} \left(D_T k^2 + \sigma_3 k^2 - \frac{\Omega^2 K_I k^4}{\rho_0 \sigma_3 k^2} \right)$ y $\lambda_5 = \frac{K_I k^2}{\gamma_1} + \frac{\Omega^2 K_I k^4}{\rho_0 \sigma_3 k^2}$. El factor de estructura dinámico $S(\vec{k}, \omega)$ es el mismo que el dado por la ecuación (5.6). Si consideramos el límite isótropo del fluido simple en un sistema de Rayleigh-Bénard, las tasas de decaimiento, considerando (4.175) y (4.176), son $\lambda_{3,4} = \frac{1}{2} (\chi + \nu) k^2$. En este caso, $S(\vec{k}, \omega)$ es similar al dado por la ecuación (5.6), en la que los coeficientes $D_3(\vec{k}, \omega)$ y $D_4(\vec{k}, \omega)$ son más simples y $D_5(\vec{k}, \omega) = 0$. En la referencia [62] pueden hallarse más detalles de este análisis.

Por otra parte, si el nemático se encuentra en un estado de equilibrio termodinámico homogéneo, $g = 0$

y $\alpha = 0$, de modo que $X = 0$ y $R(\vec{k})/R_c = 0$; en consecuencia, las expresiones correspondientes para los modos difusivos térmico, de corte y del director en este estado de equilibrio (identificado por el superíndice e), según las relaciones (4.144)-(4.146), son $\lambda_3^e \simeq D_T k^2$, $\lambda_4^e \simeq \sigma_3 k^2 - \frac{\Omega^2 K_I k^4}{\rho_0 \sigma_3 k^2}$ y $\lambda_5^e \simeq \frac{K_I k^2}{\gamma_1} + \frac{\Omega^2 K_I k^4}{\rho_0 \sigma_3 k^2}$. El espectro $S(\vec{k}, \omega)$ es el mismo que en (5.6). En el límite de un fluido simple en equilibrio, las tasas de decaimiento (4.144)-(4.146) se reducen a $\lambda_3 = D_T k^2$, $\lambda_4 = \nu k^2$ y $\lambda_5 = 0$, en tanto que los coeficientes (C.10)-(C.12) y (C.25)-(C.27), se simplifican como $C_{33} = 1$, $C_{43} = 0$, $C_{53} = 0$ y $C_{35} = C_{45} = C_{55} = 0$. Por lo tanto, en este caso (5.6) se reduce a

$$S(\vec{k}, \omega) = k_B T_0 \rho_0^2 \kappa_T \left(\frac{\gamma - 1}{\gamma} \right) \left(\frac{\partial \epsilon_{\perp}}{\partial \rho} \right)_T^2 \frac{2 D_T k^2}{\omega^2 + D_T^2 k^4}, \quad (5.11)$$

la cual es proporcional a la expresión bien conocida para el espectro de Rayleigh en un estado de equilibrio termodinámico homogéneo reportada en la literatura [62].

Finalmente, en el inicio del régimen convectivo, $R(\vec{k})/R_c = 1$, esto es, cuando $R(\vec{k})$ alcanza su valor crítico $R(\vec{k}) = R_c$, los dos modos visco-calóricos, de acuerdo con las relaciones (4.147) y (4.148), se simplifican como $\lambda_3 \simeq 0$ y $\lambda_4 \simeq D_T k^2 + \sigma_3 k^2 - \frac{\Omega^2 K_I k^4}{\rho_0 \sigma_3 k^2}$, mientras que el tercero, según (4.149), es $\lambda_5 = \frac{K_I k^2}{\gamma_1} + \frac{\Omega^2 K_I k^4}{\rho_0 \sigma_3 k^2}$. En este caso, el factor de estructura dinámico (5.6) consiste sólo de dos funciones lorentzianas. Al considerar el límite isótropo del fluido simple en el régimen de Rayleigh-Bénard, los modos hidrodinámicos, de acuerdo con (4.177) y (4.178), son $\lambda_3 = 0$ y $\lambda_4 = (\chi + \nu) k^2$. En este caso, $S(\vec{k}, \omega)$ consta sólo de una función lorentziana. En la referencia [62] pueden encontrarse más detalles al respecto.

5.4. Espectro de Rayleigh

Ya se ha mostrado que los modos normales hidrodinámicos de un cristal líquido nemático son modificados cuando está bajo los efectos de un gradiente de temperatura externo α y un campo gravitacional g . Como consecuencia, es de esperarse que la distribución espectral de la luz dispersada también cambie en el espectro de dispersión de Rayleigh. Éste último es proporcional al factor de estructura dinámico $S(\vec{k}, \omega)$ dado por la ecuación (5.6). Con la finalidad de estudiar esta cantidad, analizaremos por separado los diferentes casos en los cuales sólo el campo gravitacional o el gradiente de temperatura están presentes, o cuando ambos efectos ocurren simultáneamente.

Hasta donde sabemos, los experimentos diseñados para medir el espectro de dispersión de Rayleigh en nemáticos termótropos son bastante escasos en la literatura. Un experimento sobresaliente en el cual se considera la posibilidad de obtener convección térmica con umbrales muy bajos en películas homeótroas del nemático termótrofo MBBA, ha sido llevado a cabo hace algunos años y reportado en la referencia [132]. De acuerdo con los resultados de esta referencia, la convección puede ser evitada si la separación entre las placas de la celda nemática es $d = 0.5 \text{ mm}$ y $\Delta T < 35^\circ \text{C}$ ($= 35 \text{ K}$). Esto produce un gradiente térmico de magnitud $\alpha = \nabla T \equiv \frac{\Delta T}{d} = 700 \text{ K/cm}$. Tomando este valor como guía, usaremos $d = 0.5 \text{ mm}$ y $\Delta T < 11^\circ \text{C}$ ($= 11 \text{ K}$), lo cual corresponde a $\alpha = \nabla T \leq 220 \text{ K/cm}$. Debe señalarse que estos valores de ∇T son factibles y han sido utilizados en experimentos de dispersión de Rayleigh para fluidos simples como el tolueno [33], [124]. Con

estos valores de ∇T calcularemos el espectro de dispersión de Rayleigh del nemático termótropo MBBA, cuyos parámetros materiales están dados en la Tabla E.1 del Apéndice E. En los experimentos señalados se utiliza un láser He-Ne con $\lambda_i = 633nm$ que corresponde a un número de onda $k_i = 1.588 \times 10^5 cm^{-1}$. También asumiremos que $T \simeq 3.0 \times 10^2 K$, $g = 980 cm/s^2$ y $(\partial\epsilon_{\perp}/\partial\rho)_T \simeq 9.65 cm^3/g$. Aquí hemos usado la expresión $(\partial\epsilon_{\perp}/\partial\rho)_T = (\epsilon_{\perp} - 1)(\epsilon_{\perp} + 2)/3\rho_0$, que se obtiene al suponer que, como primer aproximación, la relación de Clausius-Massotti es válida para nemáticos [135].

Para el cálculo del espectro de dispersión de Rayleigh utilizaremos el factor de estructura normalizado, el cual de la ecuación (5.6) definimos como $\tilde{S}(\vec{k}, \tilde{\omega}) \equiv S(\vec{k}, \tilde{\omega})/S(\vec{k}, 0)$, en donde $\tilde{\omega} \equiv \omega/\chi_{\perp} k^2$ es la frecuencia angular normalizada. En el Apéndice D la forma explícita de $\tilde{S}(\vec{k}, \tilde{\omega})$ está dada por la ecuación (D.31).

5.4.1. Efectos del gradiente de temperatura

Consideremos al nemático sólo bajo la acción del gradiente de temperatura α , sin tomar en consideración los efectos del campo gravitatorio. De la ecuación (4.5) se desprende que si $g = 0$, el gradiente de temperatura efectivo es $X = -\alpha$ y la relación $R(\vec{k})/R_c$ se anula para cualquier valor de α ; consecuentemente, no existe acoplamiento entre los modos térmico y viscoso de corte. De este modo, las tasas de decaimiento λ_3 , λ_4 y λ_5 coinciden con aquellas para un cristal líquido nemático en el estado de equilibrio dadas por las expresiones (4.144)-(4.146) y corresponden a modos puramente difusivos. Estas tasas pueden ser reescritas en una forma en la cual exhiben explícitamente su dependencia con k , tal como se expresa en las definiciones (C.13) a (C.15) (ver el Apéndice C), en donde

$$\bar{\lambda}_3 = D_T, \quad (5.12)$$

$$\bar{\lambda}_4 = \sigma_3 - \frac{\Omega^2 K_I}{\rho_0 \sigma_3}, \quad (5.13)$$

$$\bar{\lambda}_5 = \frac{K_I}{\gamma_1} + \frac{\Omega^2 K_I}{\rho_0 \sigma_3}. \quad (5.14)$$

Por otra parte, al tomar en consideración las relaciones (D.28)-(D.30), el factor de estructura dinámico $S(\vec{k}, \omega)$, dado por la ecuación (5.6), puede ser reescrito explícitamente como

$$S(\vec{k}, \omega) = k_B T_0 \rho_0^2 \kappa_T \left(\frac{\gamma - 1}{\gamma} \right) \left(\frac{\partial\epsilon_{\perp}}{\partial\rho} \right)_T \left[E_3(\vec{k}) \frac{2\lambda_3}{\omega^2 + \lambda_3^2} + E_4(\vec{k}) \frac{2\lambda_4}{\omega^2 + \lambda_4^2} + E_5(\vec{k}) \frac{2\lambda_5}{\omega^2 + \lambda_5^2} \right], \quad (5.15)$$

en donde cada uno de los factores $E_i(\vec{k})$, $i = 3, 4, 5$, pueden ser separados en sus contribuciones de equilibrio y de no equilibrio

$$E_3(\vec{k}) \equiv \frac{\bar{\lambda}_3 D_T \left(\sigma_3^2 - \frac{2\Omega^2 K_I}{\rho_0} - \bar{\lambda}_3^2 \right)}{\left(\bar{\lambda}_4^2 - \bar{\lambda}_3^2 \right) \left(\bar{\lambda}_3^2 - \bar{\lambda}_5^2 \right)} + E_3^{neq}(\vec{k}), \quad (5.16)$$

$$E_4(\vec{k}) \equiv \frac{\bar{\lambda}_4 D_T \left(-\sigma_3^2 + \frac{2\Omega^2 K_I}{\rho_0} + \bar{\lambda}_4^2 \right)}{\left(\bar{\lambda}_4^2 - \bar{\lambda}_3^2 \right) \left(\bar{\lambda}_4^2 - \bar{\lambda}_5^2 \right)} - E_4^{neq}(\vec{k}), \quad (5.17)$$

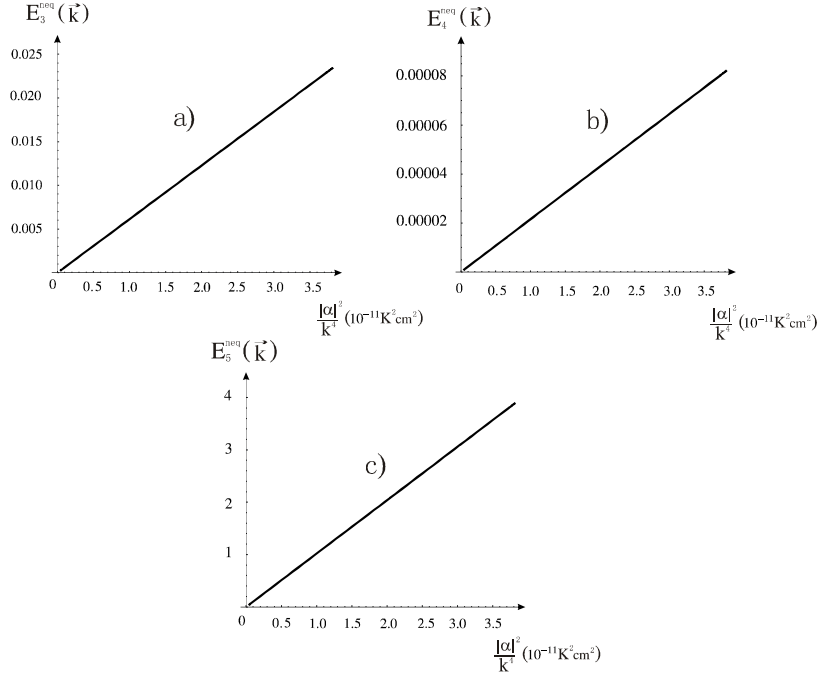


Figura 5.2: Amplitudes a) $E_3^{neq}(\vec{k})$, b) $E_4^{neq}(\vec{k})$ y c) $E_5^{neq}(\vec{k})$ de las fluctuaciones de no equilibrio como función de $|\alpha|^2/k^4$ para una capa nemática de MBBA.

$$E_5(\vec{k}) \equiv \frac{D_T \left(\frac{2\Omega^2 K_I^2 \sigma_3}{\gamma_1 \rho_0} + \frac{\Omega^4 K_I^2}{\rho_0^2} - \sigma_3^2 \bar{\lambda}_5^{-2} \right)}{\bar{\lambda}_5 \left(\bar{\lambda}_3^{-2} - \bar{\lambda}_5^{-2} \right) \left(\bar{\lambda}_4^{-2} - \bar{\lambda}_5^{-2} \right)} + E_5^{neq}(\vec{k}). \quad (5.18)$$

Aquí hemos definido las amplitudes de las fluctuaciones de no equilibrio por $E_i^{neq}(\vec{k}) \equiv E_i^*(\vec{k}) \frac{|\alpha|^2}{k^4}$, $i = 3, 4, 5$, en donde

$$E_3^*(\vec{k}) \equiv \frac{\bar{\lambda}_3 c_p \sigma_3 \hat{k}_\perp^2}{T_0 \left(\bar{\lambda}_4^{-2} - \bar{\lambda}_3^{-2} \right) \left(\bar{\lambda}_3^{-2} - \bar{\lambda}_5^{-2} \right)}, \quad (5.19)$$

$$E_4^*(\vec{k}) \equiv \frac{\bar{\lambda}_4 c_p \sigma_3 \hat{k}_\perp^2}{T_0 \left(\bar{\lambda}_4^{-2} - \bar{\lambda}_3^{-2} \right) \left(\bar{\lambda}_4^{-2} - \bar{\lambda}_5^{-2} \right)}, \quad (5.20)$$

$$E_5^*(\vec{k}) \equiv \frac{c_p \sigma_3 \left(\chi_a^2 \Omega^2 + \chi_a^2 \frac{\sigma_3 \rho_0}{\gamma_1} - \bar{\lambda}_5^{-2} \right) \hat{k}_\perp^2}{T_0 \bar{\lambda}_5 \left(\bar{\lambda}_3^{-2} - \bar{\lambda}_5^{-2} \right) \left(\bar{\lambda}_4^{-2} - \bar{\lambda}_5^{-2} \right)}. \quad (5.21)$$

Esta dependencia inversa es indicativa de la naturaleza de largo alcance de las fluctuaciones de no equilibrio cuando un gradiente de temperatura es aplicado. Obsérvese también que las modificaciones causadas por los efectos de no equilibrio al espectro de Rayleigh alcanzan su máxima intensidad cuando $\hat{k}_\perp = 1$, esto es, a ángulos de dispersión bastante bajos o cuando el vector de onda de dispersión es prácticamente perpendicular al gradiente de temperatura. En el caso de un vector de onda k , para el cual $\hat{k}_\perp = 0$, los efectos debidos a las fuerzas externas se anulan. Cabe señalar que si tomamos el límite del fluido simple, el espectro de Rayleigh (5.15) y los términos fuera de equilibrio $E_3^{neq}(\vec{k})$, $E_4^{neq}(\vec{k})$, se reducen a los dados por

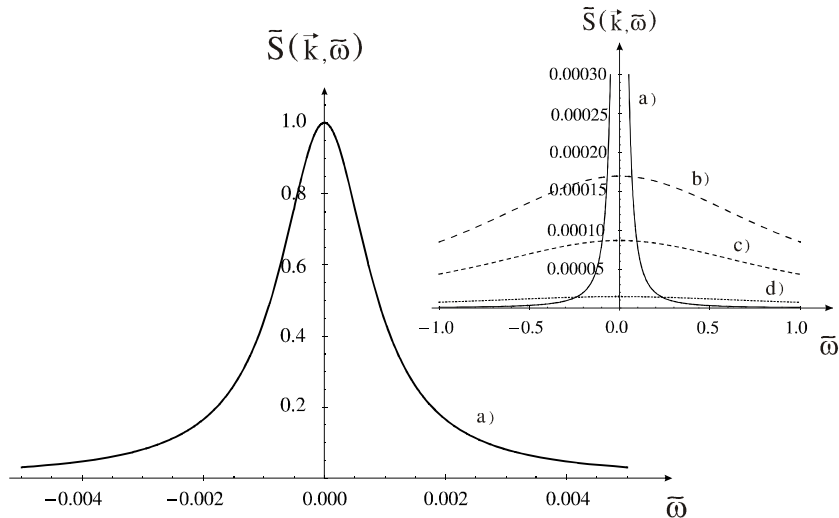


Figura 5.3: Factor de estructura dinámico normalizado $\tilde{S}(\vec{k}, \tilde{\omega})$ como función de la frecuencia angular normalizada $\tilde{\omega}$ para una capa nemática de MBBA sin la presencia del campo gravitacional ($g = 0$). En este caso el espectro de Rayleigh consta de una lorentziana localizada en el centro determinada principalmente por las contribuciones de las fluctuaciones del director (curva a)). En el recuadro se compara la curva a) con contribuciones de las fluctuaciones de la entropía (alas de Rayleigh) para tres gradientes de temperatura diferentes: b) $\alpha = 0$, c) $\alpha = 0.6K/cm$ y d) $\alpha = 2K/cm$. Aquí $k_i = 1.588 \times 10^5 cm^{-1}$ y $k = 285.87 cm^{-1}$ (que corresponde a $\theta = 1.8 \times 10^{-3} rad \simeq 0.1^\circ$).

las ecuaciones (3.12) y (3.14) de la referencia [62]. Para un fluido simple, sus correspondientes amplitudes de no equilibrio han sido medidas experimentalmente, como una función de $|\alpha|^2/k^4$, empleando técnicas de dispersión de luz para ángulos pequeños. Los resultados teóricos están en concordancia con los obtenidos experimentalmente [33].

Sin embargo, hasta donde sabemos, en el caso de capas de cristal líquido nemático no existen resultados experimentales similares con los cuales comparar. Por esta razón resulta conveniente calcular otras propiedades físicas tales como las amplitudes $E_3^{neq}(\vec{k})$, $E_4^{neq}(\vec{k})$, $E_5^{neq}(\vec{k})$ como función de $(\nabla T)^2/k^4$. Estas cantidades han sido medidas para el fluido simple empleando valores similares de los gradientes térmicos y números de onda señalados con antelación [124]. Considerando valores de k en el intervalo $1550 cm^{-1} - 2550 cm^{-1}$ y $20K/cm \leq \alpha \leq 220K/cm$, obtenemos para los coeficientes (5.19) a (5.21), las magnitudes $E_3^*(\vec{k}) \simeq 6.139 \times 10^8 K^{-2} cm^{-2}$, $E_4^*(\vec{k}) \simeq 2.151 \times 10^6 K^{-2} cm^{-2}$ y $E_5^*(\vec{k}) \simeq 1.019 \times 10^{11} K^{-2} cm^{-2}$. Estos valores corresponden a las pendientes de las líneas rectas mostradas en la Figura 5.2. Si bien las cantidades (5.19) a (5.21) en general son funciones de k , debe señalarse que permanecen prácticamente constantes en el intervalo que se ha considerado para esta variable.

El factor de estructura dinámico $\tilde{S}(\vec{k}, \tilde{\omega})$ determinado por la ecuación (5.15) se muestra en la Figura 5.3. Se reduce a su expresión en equilibrio, ecuación (5.6), cuando $\alpha = 0$, y todavía contiene tres funciones

lorentzianas. No obstante, de esas lorentzianas la predominante es el tercer término debido a las fluctuaciones del director, y su intensidad es cuatro órdenes de magnitud mayor que las fluctuaciones de la entropía dadas por el primer término. Esto se manifiesta en el espectro de Rayleigh como un único pico de magnitud unitaria localizado en el origen (ver la Figura 5.3).

Finalmente, encontramos que el espectro de Rayleigh se ensancha en su base dando lugar a las curvas *b*), *c*), *d*) mostradas en el recuadro de la Figura 5.3, las cuales son más amplias y cuentan con una altura mucho menor que la del pico unitario (cuatro órdenes de magnitud). Esta característica es completamente debida a las fluctuaciones de la entropía y son denominadas alas de Rayleigh [93]. Incluso, en ausencia de un gradiente de temperatura puede mostrarse que estas alas de Rayleigh están presentes en el espectro. Sin embargo, conforme el gradiente de temperatura se incrementa, observamos que las alas de Rayleigh comienzan a ensancharse y a reducir aún más su altura (ver la Figura 5.3).

5.4.2. Efectos de la gravedad

Con el propósito de mostrar la potencial influencia de la gravedad en el espectro de Rayleigh analizaremos sus efectos sobre el factor de estructura dinámico normalizado $\tilde{S}(\vec{k}, \tilde{\omega})$, ecuación (5.6), en ausencia del gradiente de temperatura. En este caso $g \neq 0$, $\alpha = 0$ y, de acuerdo con (4.5), $X \equiv g\beta T_0/c_p$ y (5.9) se reduce a

$$\frac{R(\vec{k})}{R_c} \equiv -\frac{g^2 \beta^2 (T_0/c_p) \hat{k}_\perp^2}{D_T \sigma_3 k^4}, \quad (5.22)$$

la cual siempre es negativa. De acuerdo con (5.22), existe una relación efectiva de número de Rayleigh $R(\vec{k})/R_c$ distinta de cero aun en ausencia de un gradiente de temperatura aplicado externamente. Esto significa que todavía tendremos modos visco-calóricos acoplados ante la presencia de sólo un campo gravitacional externo. En general, los modos visco-calóricos (5.7) serán difusivos, a menos que para longitudes de onda suficientemente cortas (o ángulos de dispersión sumamente pequeños), $R(\vec{k})/R_c < R_0(\vec{k})$ se satisfaga, y serán propagativos. Mediante las definiciones de k , k_\parallel y k_\perp , la relación $R(\vec{k})/R_c$ y $R_0(\vec{k})$, dadas por (5.22) y (4.137), respectivamente, pueden escribirse como funciones de θ . Puede verse que valores muy pequeños de θ (del orden de 10^{-6} rad) son requeridos para asegurar que $R(\theta)/R_c$ va a ser menor que $R_0(\theta)$. En otras palabras, estos son los valores de θ que son requeridos para que los modos visco-calóricos (5.7) cambien su naturaleza difusiva a propagativa.

De esta manera, si $\theta = 2 \times 10^{-2}$ rad (lo cual corresponde a 1.15° , $k = 3.18 \times 10^3 \text{ cm}^{-1}$ y $R/R_c = -3.74355 \times 10^{-16}$), $\tilde{S}(\vec{k}, \tilde{\omega})$ consiste de una sola lorentziana, como en el caso en el que sólo el gradiente de temperatura está presente (ver la Figura 5.3). Esta forma del espectro es mantenida conforme los ángulos de dispersión decrecen, excepto cuando $R(\theta)/R_c$ comienza a estar por debajo de $R_0(\theta)$, y comienza a ser evidente la naturaleza propagativa de los modos visco-calóricos. En esta situación comienza a ser notable en el espectro la existencia de dos picos simétricamente localizados a ambos lados de la lorentziana. Este par de picos están desplazados con respecto al pico central e incrementan su altura conforme decrecen los ángulos de dispersión. Su comportamiento se ilustra en la Figura 5.4, en donde $\tilde{S}(\vec{k}, \tilde{\omega})$ es graficado para los siguientes

tres ángulos rasantes: $\theta = 1.0 \times 10^{-6} \text{rad}$ ($\theta = (5.7 \times 10^{-5})^\circ$, $k = 1.59 \times 10^{-1} \text{cm}^{-1}$ y $R/R_c = -59.9512$) (línea continua); $\theta = 0.6 \times 10^{-6} \text{rad}$ ($\theta = (3.4 \times 10^{-5})^\circ$, $k = 9.53 \times 10^{-2} \text{cm}^{-1}$ y $R/R_c = -462.587$), (línea discontinua) y $\theta = 0.45 \times 10^{-6} \text{rad}$ ($\theta = (2.6 \times 10^{-5})^\circ$, $k = 7.15 \times 10^{-2} \text{cm}^{-1}$ y $R/R_c = -1462$), (línea punteada). Para estos ángulos pequeños $R_0(\theta)$ es prácticamente constante y alcanza el valor $R_0 \simeq -70.8258$. Obsérvese que en la Figura 5.4 la lorentziana central es imperceptible.

Debe mencionarse que, hasta donde sabemos, los vectores de onda obtenidos en experimentos de dispersión de Rayleigh para ángulos pequeños no son menores a 1528cm^{-1} [33], [62], que corresponde a un ángulo de dispersión $\theta = 9.61 \times 10^{-3} \text{rad}$ ($\theta = 0.55^\circ$). Este ángulo da lugar a valores de R/R_c que están muy por encima de R_0 . En consecuencia en un cristal líquido nemático termótropo como el MBBA, los efectos gravitatorios en el espectro de Rayleigh son demasiado pequeños para ser detectados en la práctica.

En este régimen $\tilde{S}(\vec{k}, \tilde{\omega})$ tiene la misma estructura como en el caso general, ecuación (5.6), pero sus coeficientes $D_3(\vec{k}, \tilde{\omega})$, $D_4(\vec{k}, \tilde{\omega})$ y $D_5(\vec{k}, \tilde{\omega})$, en ausencia de los términos que contienen a g , son relativamente más simples que los dados por las ecuaciones (D.22) a (D.24). Debe enfatizarse que la expresión analítica del factor de estructura dinámico escrita en términos de $\Omega_0(\vec{k})$, $\Lambda_0(\vec{k})$, dada por la ecuación (5.10), nos permitiría determinar la posición de los picos desplazados. En este régimen se observa nuevamente la presencia de las alas de Rayleigh. Sin embargo, la presencia del campo gravitatorio no incrementa sus amplitudes ni altura, en contraste con el caso en que esta fuerza externa está ausente (ver el recuadro en la Figura 5.3).

5.4.3. Efectos simultáneos de la gravedad y del gradiente de temperatura

Los resultados de las subsecciones previas sugieren que cambios significativos deberían ocurrir en el espectro de Rayleigh de un cristal líquido nemático bajo los efectos combinados de la gravedad y un gradiente de temperatura. Dado que en este caso $g \neq 0$ y $\alpha \neq 0$, el gradiente de temperatura efectivo y la relación de número de Rayleigh, respectivamente, poseen la misma estructura como en las ecuaciones (4.5) y (5.9). De (5.9) puede verse que para $g \neq 0$, la razón de número de Rayleigh no se anula y que de acuerdo con las ecuaciones (5.7), siempre deberían existir dos modos visco-calóricos acoplados con tasas de decaimiento λ_3 y λ_4 . En experimentos típicos fuera de equilibrio, ocurre que $|\alpha| > 1$ y $g\beta T_0/c_p \sim 10^{-6}$; en consecuencia, dado que $|\alpha| \gg g\beta T_0/c_p$, la contribución de $g\beta T_0/c_p$ al gradiente de temperatura efectivo total X puede omitirse en la práctica.

Tal como ocurre en experimentos realizados para fluidos simples [62], es de esperarse que las fluctuaciones exhiban un comportamiento muy diferente dependiendo de si la capa nemática es calentada por debajo o por arriba. A diferencia de lo que sucede en fluidos ordinarios homogéneos, en los que sólo pueden ocurrir fenómenos convectivos si el gradiente de temperatura es aplicado desde abajo, en una capa de cristal líquido nemático estos efectos pueden ser producidos al aplicar el gradiente de temperatura tanto desde abajo como desde arriba [132]. No obstante, si bien nuestro interés se centra en considerar un cristal líquido nemático en un estado estacionario, consideraremos la situación en donde éste permanece en un

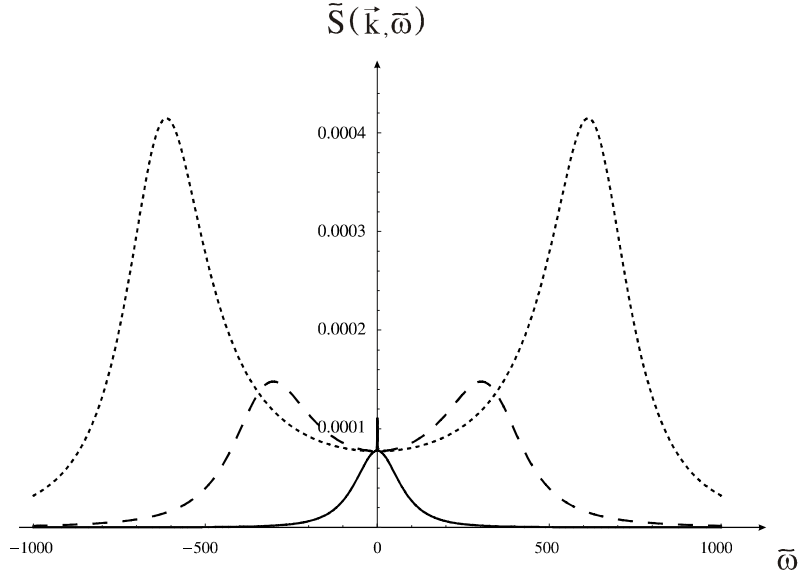


Figura 5.4: Factor de estructura dinámico normalizado $\tilde{S}(\vec{k}, \tilde{\omega})$ como función de la frecuencia angular normalizada $\tilde{\omega}$, para una capa nemática de MBBA bajo la presencia sólo del campo gravitatorio $g = 980 \text{ cm/s}^2$ y sin la influencia de un gradiente de temperatura ($\alpha = 0$). Los ángulos de dispersión considerados son: $\theta = 1.0 \times 10^{-6} \text{ rad}$ (línea continua), $\theta = 0.6 \times 10^{-6} \text{ rad}$ (línea discontinua) y $\theta = 0.45 \times 10^{-6} \text{ rad}$ (línea punteada).

estado quiescente hidrodinámico donde los efectos convectivos no están presentes. A continuación estudiaremos el calentamiento de una capa nemática considerando que el gradiente de temperatura actúa en ambas direcciones.

5.4.3.1. Calentamiento por debajo

Cuando la capa nemática es calentada por debajo, el gradiente de temperatura α tiene la misma dirección que el campo gravitacional g y la razón (5.9) siempre es positiva. Como consecuencia, $R(\vec{k})/R_c > R_0(\vec{k})$ y los modos visco-calóricos λ_3 y λ_4 invariablemente serán difusivos. Por consiguiente, dado que no pueden existir modos visco-calóricos propagativos, el espectro de dispersión de luz no puede presentar picos simétricamente localizados a ambos lados del pico central, como se muestra en la Figura 5.4. Encontramos que el factor de estructura dinámico normalizado $\tilde{S}(\vec{k}, \tilde{\omega})$ es una sola lorentziana localizada en el origen. Finalmente, observamos que la forma de esta curva no cambia al variar la magnitud del gradiente de temperatura ni del ángulo de dispersión.

5.4.3.2. Calentamiento por arriba

En el caso de que α tenga una dirección opuesta a g la razón (5.9) puede ser negativa. Cuando un gradiente de temperatura pequeño está presente, de modo que $R(\vec{k})/R_c > R_0(\vec{k})$, las tasas λ_3 y λ_4

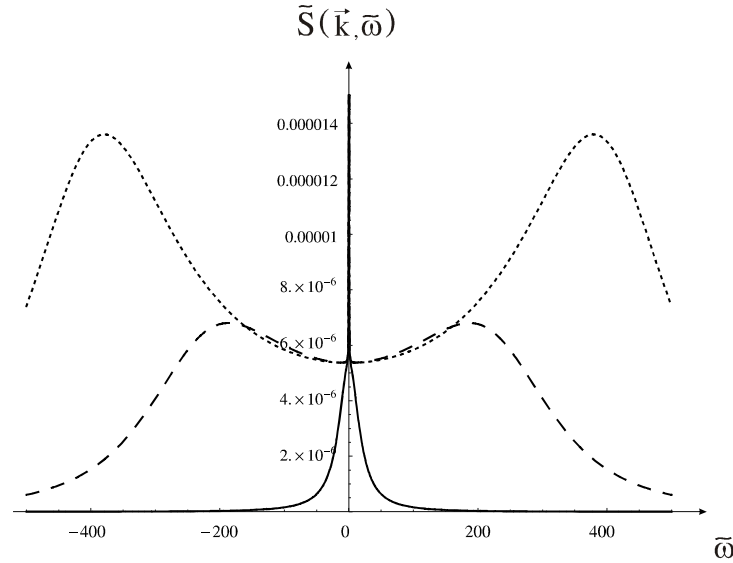


Figura 5.5: Factor de estructura dinámico normalizado $\tilde{S}(\vec{k}, \tilde{\omega})$ como una función de la frecuencia angular normalizada $\tilde{\omega}$, para una capa nemática de MBBA bajo la presencia del campo gravitatorio $g = 980\text{cm}/\text{s}^2$ y calentada desde arriba por un gradiente de temperatura $\alpha = -220\text{K}/\text{cm}$. Los ángulos de dispersión considerados son: $\theta = 1.8 \times 10^{-4}\text{rad}$ (línea continua), $\theta = 1.0 \times 10^{-4}\text{rad}$ (línea discontinua) y $\theta = 0.7 \times 10^{-4}\text{rad}$ (línea punteada).

decaen difusivamente. Sin embargo, para gradientes de temperatura suficientemente grandes la capa nemática puede presentar un estado sobre-estabilizado en el cual los modos visco-calóricos λ_3 y λ_4 son propagativos. Esto puede conseguirse si el gradiente de temperatura es suficientemente intenso de modo que $R(\vec{k})/R_c < R_0(\vec{k})$. Considerando a $R(\theta)/R_c$ y $R_0(\theta)$ como funciones del ángulo de dispersión θ , puede verse que se requieren valores bastante pequeños de θ (del orden de 10^{-4}rad) para garantizar que los modos visco-calóricos (5.7) cambien su naturaleza difusiva por otra propagativa.

Esta situación es bastante similar a aquella hallada en el caso en el cual sólo el campo gravitacional está presente: son requeridos ángulos de dispersión bastante pequeños para visualizar los efectos propagativos de los modos visco-calóricos en el espectro de dispersión de luz. Con el propósito de mostrar los efectos sobre el espectro analizaremos el factor de estructura dinámico normalizado $\tilde{S}(\vec{k}, \tilde{\omega})$ como función de $\tilde{\omega}$ para diferentes valores fijos pequeños de θ . Nuestros resultados se muestran en la Figura 5.5, en donde $\tilde{S}(\vec{k}, \tilde{\omega})$ es graficado para: $\theta = 1.8 \times 10^{-4}\text{rad}$ ($\theta = (1.0 \times 10^{-2})^\circ$, $k = 28.6\text{cm}^{-1}$ y $R/R_c = -35.8584$), (línea continua); $\theta = 1.0 \times 10^{-4}\text{rad}$ ($\theta = (5.7 \times 10^{-3})^\circ$, $k = 15.9\text{cm}^{-1}$ y $R/R_c = -376.428$), (línea discontinua), y $\theta = 0.7 \times 10^{-4}\text{rad}$ ($\theta = (4.0 \times 10^{-3})^\circ$, $k = 11.1\text{cm}^{-1}$ y $R/R_c = -1567.8$), (línea punteada). $R_0(\theta)$ es prácticamente constante y alcanza el valor $R_0 \simeq -70.8258$. Obsérvese que en la Figura 5.5 la lorentziana central es impreceptible. Debe señalarse que ante la presencia de ambas fuerzas externas los valores requeridos de θ para los modos visco-calóricos puedan ser propagativos son dos órdenes de magnitud menores que

los requeridos para generarlos donde sólo está presente el campo gravitatorio. Aun así, esta comparación muestra que en el primer caso estos valores angulares son más pequeños que los del segundo. Las figuras 5.4 y 5.5, muestran que lo opuesto ocurre con respecto a la intensidad del espectro. Nuevamente, observamos la presencia de alas de Rayleigh; la presencia de un gradiente de temperatura en este régimen ocasiona que éstas sean más anchas y de menor altura.

5.5. Función de dispersión intermedia

La inversión de Fourier del factor de estructura dinámico $S(\vec{k}, \omega)$ da lugar a la función de correlación temporal (la denominada función de van Hove) [1]

$$I(\vec{k}, t) = \int_{-\infty}^{\infty} S(\vec{k}, \omega) e^{-i\omega t} d\omega. \quad (5.23)$$

Debe notarse que $I(\vec{k}, t)$ depende de la naturaleza difusiva o propagativa de las tasas de decaimiento visco-calóricas $\lambda_{3,4}$ dadas por la ecuación (5.7). Más aún, cuando $R(\vec{k})/R_c < R_0(\vec{k})$, las tasas de decaimiento visco-calóricas $\lambda_{3,4}$ son complejas conjugadas, y la tasa de decaimiento λ_5 es real. Por consiguiente, para este caso, al sustituir la ecuación (5.10) en la (5.23) obtenemos la función de correlación temporal

$$\begin{aligned} I^{prop}(\vec{k}, t) = & 2\pi k_B T_0 \rho_0^2 \kappa_T \left(\frac{\gamma - 1}{\gamma} \right) \left(\frac{\partial \epsilon_{\perp}}{\partial \rho} \right)_T^2 \{ e^{-\Omega_0 t} [(F_1 + G_1) \cos \Lambda_0 t \\ & + \Omega_0 (F_2 - G_2) \text{sen} \Lambda_0 t - \Lambda_0 (F_2 + G_2) \cos \Lambda_0 t] + H_1 e^{-\lambda_5 t} \}, \end{aligned} \quad (5.24)$$

en donde los coeficientes F_1 , F_2 , G_1 , G_2 y H_1 están dados, respectivamente, por las ecuaciones (D.37)-(D.41) (ver el Apéndice D). Obsérvese que la presencia de funciones trigonométricas en la ecuación (5.24) hace evidente la naturaleza propagativa de las fluctuaciones. Es importante señalar que para fluidos simples $I^{prop}(\vec{k}, t)$ es medida usualmente por medio de dispersión de neutrones [1], pero también puede cuantificarse mediante la técnica de dispersión de luz de Rayleigh forzada [133]. Si estos resultados experimentales estuvieran disponibles para cristales líquidos, podrían proporcionar una forma alternativa para comparar nuestra teoría con el experimento.

Por otra parte, en el régimen $R_0(\vec{k}) < R(\vec{k})/R_c < 1$, todas las tasas de decaimiento λ_3 , λ_4 , λ_5 con cantidades reales, y la sustitución de la ecuación (5.6) en la (5.23) da lugar a la correspondiente función de dispersión intermedia

$$I^{dif}(\vec{k}, t) = 2\pi k_B T_0 \tilde{I}^{dif}(\vec{k}, t), \quad (5.25)$$

con

$$\tilde{I}^{dif}(\vec{k}, t) \equiv D_3(\vec{k}) e^{-\bar{\lambda}_3 k^2 t} + D_4(\vec{k}) e^{-\bar{\lambda}_4 k^2 t} + D_5(\vec{k}) e^{-\bar{\lambda}_5 k^2 t} \quad (5.26)$$

en donde los coeficientes $D_3(\vec{k})$, $D_4(\vec{k})$ y $D_5(\vec{k})$, están dados, respectivamente, por las ecuaciones (D.28), (D.29) y (D.30) del Apéndice D. Debe observarse que la función de dispersión intermedia $\tilde{I}^{dif}(\vec{k}, t)$ definida anteriormente, en el caso límite de un fluido simple, se reduce a la ecuación (11) de la referencia [33],

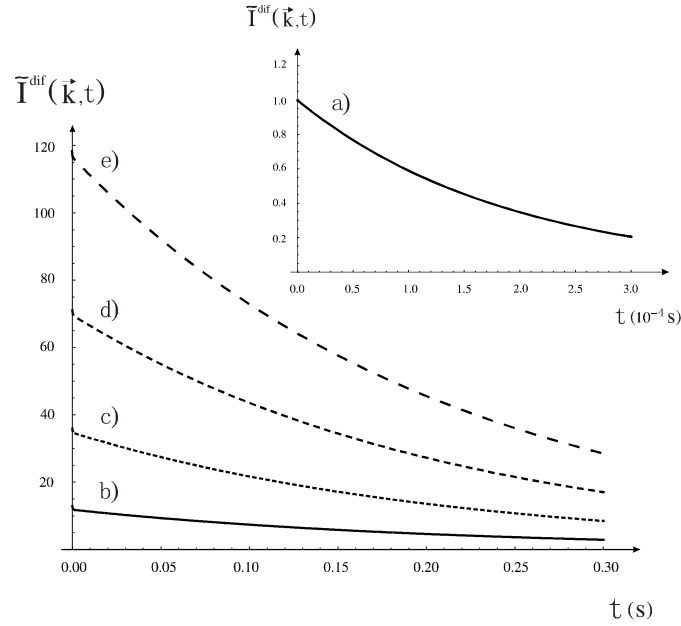


Figura 5.6: Función de dispersión intermedia $\bar{I}^{dif}(k, t)$ para una capa nemática de MBBA obtenida con $k = 2250\text{cm}^{-1}$ para, a) el estado de equilibrio ($\alpha = 0\text{ K/cm}$), y diferentes estados de no equilibrio debidos a los cuatro gradientes de temperatura: b) $\alpha = 70\text{ K/cm}$, c) $\alpha = 120\text{ K/cm}$, d) $\alpha = 170\text{ K/cm}$ y e) $\alpha = 220\text{ K/cm}$.

obtenida al considerar la técnica heterodina de dispersión de luz. Al comparar la ecuación (5.26) con la (11), puede hacerse la identificación $\tilde{I}^{dif}(\vec{k}, t) = (C(k, t)/C_B - 1)/C_0$, en donde $C(k, t)$ representa la función de correlación experimental del campo eléctrico dispersado, C_0 es la intensidad de la señal cuando $\nabla T = 0$ y C_B la contribución de fondo; obsérvese que en esta situación, (5.26) presenta una estructura similar a la dada por la expresión (3.28).

En este último régimen calculamos $\tilde{I}^{dif}(\vec{k}, t)$ para $k = 2250\text{cm}^{-1}$ en estado de equilibrio y estados de no equilibrio debidos a los gradientes de temperatura $\alpha = 70\text{K/cm}$, $\alpha = 120\text{K/cm}$, $\alpha = 170\text{K/cm}$ y $\alpha = 220\text{K/cm}$. Estos valores para k son usados en experimentos para fluidos simples [33] y los valores de α son consistentes con la condición que evita la convección, tal como se discutió con anterioridad. La gráfica de $\tilde{I}^{dif}(\vec{k}, t)$ vs. t se muestra en la Figura 5.6. Obsérvese que la contribución de no equilibrio de $\tilde{I}^{dif}(\vec{k}, t)$, puede ser (para $\alpha = 220\text{K/cm}$) dos órdenes de magnitud mayor que la contribución de equilibrio y ocurre a una escala horizontal que es tres órdenes de magnitud mayor que en equilibrio (ver el recuadro).

Además de una comparación directa entre el espectro predicho con nuestra teoría y el experimento, una comparación adicional entre nuestra teoría y el experimento usando dispersión de luz de Rayleigh podría ser la comparación de esta curva contra mediciones experimentales de $\tilde{I}^{dif}(\vec{k}, t)$, si dichos experimentos pudieran existir para cristales líquidos.

Capítulo 6

Espectro de dispersión de luz de un nemático bajo un gradiente de presión constante externo

6.1. Introducción

En los capítulos 4 y 5 se calcularon, respectivamente, los modos hidrodinámicos y el espectro de dispersión de Rayleigh de una capa nemática en un estado estacionario de no equilibrio producido por la presencia de un gradiente de temperatura uniforme y un campo gravitatorio constante. Si bien para esta última situación los resultados obtenidos son originales, se encontró que el efecto producido por la sola presencia del campo gravitatorio o la de éste combinado con el gradiente de temperatura resulta pequeño y probablemente difícil de reproducir experimentalmente. Para el caso en que una capa nemática se encuentra en un estado de no equilibrio inducido por la presencia de un flujo de corte estacionario, los resultados reportados han sido también similares [57]. El análisis de los cambios en el espectro de dispersión de luz en estados estacionarios generados por la presencia de gradientes de otro tipo ha sido escasamente tratada en la literatura, incluso para fluidos simples. Aquí estudiaremos los cambios que experimenta dicho espectro, en un estado estacionario propiciado por la presencia de un gradiente de presión uniforme externo, lo cual resulta novedoso, pues hasta donde sabemos, no ha sido tratado este caso con anterioridad.

A diferencia del tratamiento realizado en el capítulo anterior en donde se consideró que el gradiente de temperatura era paralelo a la orientación inicial del campo director, en esta nueva situación física, el gradiente de presión se encuentra en una dirección perpendicular a la orientación inicial de dicho campo. Esto representa una mayor complejidad, ya que el marco dado por las ecuaciones nematodinámicas estocásticas (2.128)-(2.134) resulta incompleto debido a que no contienen los términos que involucran al flujo estacionario inducido por la presencia del gradiente de presión externo. Por tal motivo, es necesario partir de las ecuaciones

de conservación y balance (1.161)-(1.163) para describir adecuadamente la dinámica de las fluctuaciones de las variables nemáticas que incorporen la presencia de dicho flujo y deducir un nuevo conjunto de ecuaciones nematodinámicas fluctuantes estocásticas linealizadas alrededor del estado estacionario mencionado. Además, una vez obtenido este nuevo conjunto de ecuaciones, se tendría que optar por un cambio de representación adecuado de las variables nemáticas, como se hizo en el Capítulo 4, con el propósito de explotar las propiedades de simetría del sistema en forma conveniente y poder así simplificar los cálculos involucrados. Esto último será fundamental, en particular, para facilitar el cálculo de los modos hidrodinámicos del nemático que, como ocurrió para el estado estacionario producido por el gradiente de temperatura uniforme y el campo gravitacional constante, ante la presencia del gradiente de presión externo seguramente se verán modificados.

La dificultad inherente al cálculo de las raíces del polinomio característico de quinto orden que conduce a los modos hidrodinámicos longitudinales, en esta nueva situación física convierte en urgente la necesidad de hallar tal marco coordenado adecuado. Dada esta problemática, como un primer intento, en este capítulo calcularemos el espectro de dispersión de luz generado por las variables transversales nemáticas, las cuales dan lugar únicamente a un sistema de dos ecuaciones diferenciales estocásticas.

6.2. Modelo

Se tiene una capa delgada de cristal líquido nemático de configuración inicial homeótropa, de espesor d y confinada entre dos placas planas paralelas, cuyas longitudes son mucho mayores que la separación a la que se encuentran, de manera que puedan considerarse infinitas. Consideremos que en el interior de la celda se produce un flujo estacionario laminar e incompresible producido por un gradiente de presión uniforme externo ∇p paralelo a las placas de la forma

$$\nabla p \equiv |\nabla p| \hat{y}, \quad (6.1)$$

en donde $|\nabla p| = dp/dy$ y \hat{y} denota al vector unitario a lo largo del eje y tal como se ilustra en la Figura 6.1.

6.2.1. Estado estacionario

En el estado estacionario (que indicaremos por el superíndice st) se produce un flujo de tipo Poiseuille a lo largo del eje y ,

$$\vec{v}^{st} = v_y^0(z) \hat{y} \quad (6.2)$$

cuyo perfil parabólico de velocidades esta dado por

$$v_y^0(z) = \frac{|\nabla p|}{2\nu_3} \left[z^2 - \left(\frac{d}{2} \right)^2 \right] \quad (6.3)$$

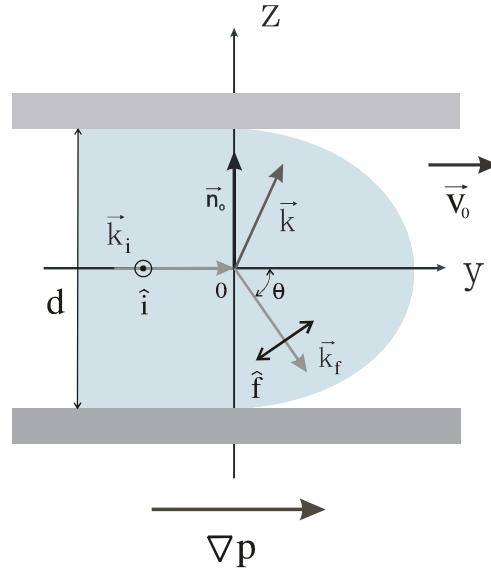


Figura 6.1: Representación esquemática de la celada nemática homeótropa plana sujeta a un gradiente de presión externo ∇p . \vec{k}_i es el vector de onda de la luz incidente y \vec{k}_f el vector de onda de la luz dispersada, $\vec{k} = \vec{k}_i - \vec{k}_f$ es el vector de onda de dispersión y θ es el ángulo de dispersión. Además, \hat{i} y \hat{f} son, respectivamente, las polarizaciones de los haces incidente y dispersado.

en donde ν_3 uno de los coeficientes viscosos definidos en (1.152). Si definimos el gradiente de presión adimensional

$$\gamma_p \equiv \frac{\rho_0 d^3}{\nu_3^2} |\nabla p|, \quad (6.4)$$

en donde ρ_0 es la densidad de masa en el estado de referencia, el campo de velocidades (6.3) puede escribirse en la forma

$$v_y^0(z) = \gamma_p (\tilde{a} - \tilde{b}z^2), \quad (6.5)$$

en la cual $\tilde{a} \equiv \nu_3/(8\rho_0 d)$, $\tilde{b} \equiv \nu_3/(2\rho_0 d^3)$. Sólo consideraremos estados estacionarios para los cuales se cumplen las condiciones siguientes [25]:

$$\nabla_i v_i^{st} = 0, \quad (6.6)$$

$$\nabla_i p^{st} = 0, \quad (6.7)$$

$$\nabla_j n_i^{st} = 0. \quad (6.8)$$

El perfil estacionario de velocidades está completamente determinado por la ecuación de conservación de la cantidad de movimiento (1.162) al tomar en cuenta las condiciones a la frontera $v_y^0 = 0$ en $z = -d/2$ y $v_y^0 = 0$ en $z = d/2$ de ausencia de deslizamiento de flujo en las placas, y al suponer que se cumple en este caso la ley de Newton de la viscosidad que relaciona a los esfuerzos cortantes con el gradiente de velocidades. Al ser el estado estacionario incompresible, se cumple que $\nu_4 = \nu_2$ y $\nu_5 = 0$ [46]. La forma explícita del perfil

de presiones toma la forma

$$p^{st}(y) = p_0 - y\nabla p = p_0 \left(1 - \frac{\nabla p}{p_0} y\right), \quad (6.9)$$

en donde $p_0 = p^{st}(y=0)$ y $\nabla p = (p_1 - p_2)/L$, siendo $L \gg d$ la longitud de las placas. Aquí sólo se considerarán capas de fluido nemático de espesor pequeño ($d \lesssim 1\text{cm}$) y $T_0 \simeq 3.0 \times 10^2 K$.

6.3. Ecuaciones nematodinámicas linealizadas

Dado que únicamente se describirá la dinámica de las variables transversales en el estado estacionario definido con anterioridad, de las ecuaciones de conservación y balance (1.161)-(1.163) sólo se requerirán las ecuaciones de conservación de la cantidad de movimiento y de relajación del director

$$\rho \frac{\partial}{\partial t} v_i + v_j \nabla_j v_i + \nabla_j \sigma_{ij} = 0, \quad (6.10)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} n_i + v_j \nabla_j n_i + Y_i = 0. \quad (6.11)$$

Las desviaciones o fluctuaciones de las variables nematodinámicas respecto de sus valores en el estado estacionario se definen por

$$\rho(\vec{r}, t) = \rho^{st} + \delta\rho(\vec{r}, t), \quad (6.12)$$

$$v_i(\vec{r}, t) = v_i^{st} + \delta v_i(\vec{r}, t), \quad (6.13)$$

$$n_i(\vec{r}, t) = n_i^{st} + \delta n_i(\vec{r}, t); \quad (6.14)$$

de la misma manera, las desviaciones de la corriente σ_{ij} y la cuasicorriente Y_i son

$$\sigma_{ij}(\vec{r}, t) = \sigma_{ij}^{st} + \delta\sigma_{ij}(\vec{r}, t) \quad (6.15)$$

$$Y_i(\vec{r}, t) = Y_i^{st} + \delta Y_i(\vec{r}, t). \quad (6.16)$$

Dado que la orientación inicial de director \hat{n}^{st} es a lo largo del eje z , y que nos limitaremos a hacer una descripción en el plano coordenado xy , el conjunto de variables nemáticas fluctuantes transversales es $\{\delta n_x(\vec{r}, t), \delta v_x(\vec{r}, t)\}$. De esta manera, al tomar en cuenta el perfil de velocidades (6.5) y el conjunto de variables transversales señalado, al introducir las definiciones anteriores en las ecuaciones (6.10)-(6.11) se obtiene el conjunto de ecuaciones linealizadas y fluctuantes para el estado estacionario definido por (6.6)-(6.8)

$$\rho^{st} \frac{\partial}{\partial t} \delta v_x + \rho^{st} v_y^{st} \nabla_y \delta v_x = -\nabla_j \delta\sigma_{xj}, \quad (6.17)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \delta n_x + v_y^{st} \nabla_y \delta n_x = -\delta Y_x. \quad (6.18)$$

en donde $\delta\sigma_{xj}$ y δY_x , están dadas por

$$\delta\sigma_{xj} = \frac{1}{2} \lambda_{kjj}^{st} K_{kjjl}^{st} \nabla_j \nabla_l \delta n_x - \nu_{xjxl}^{st} \nabla_l \delta v_x - (\nu_3 - \nu_2) \nabla_z v_y^{st} \delta_{jj} n_z^{st} \delta n_x \quad (6.19)$$

$$\delta Y_x = -\frac{1}{2} \lambda_{xjj}^{st} \nabla_j \delta v_x - \frac{1}{\gamma_1} \delta_{xk}^{\perp st} K_{kjjl}^{st} \nabla_j \nabla_l \delta n_x, \quad (6.20)$$

siendo $\delta_{ik}^{\perp st} = \delta_{ik} - n_i^{st} n_k^{st}$.

Las variables nematodinámicas $\psi^{st} = \{\rho^{st}, v_i^{st}, n_i^{st}\}$, así como los coeficientes de transporte $\nu_1^{st}, \nu_2^{st}, \nu_3^{st}$, γ_1^{st} y las constantes elásticas K_1^{st}, K_3^{st} presentes en ν_{xjxl}^{st} y K_{kjl}^{st} , en principio pueden depender de variables termodinámicas como, por ejemplo, la presión p y la entropía específica s ; por lo tanto, es de esperarse que en el estado estacionario considerado se vean también afectados por la presencia del gradiente de presión externo, y que los cambios ocurran sólo en la dirección y en la que éste es aplicado. Una forma bastante general de escribir cualquiera de estas cantidades ψ^{st} así como de los parámetros materiales nemáticos en el estado estacionario señalado, consiste en desarrollarlos en series de Taylor alrededor del estado de equilibrio [25], únicamente hasta términos de primer orden, dando lugar, por ejemplo, para las variables ψ^{st} , a un perfil similar al de la expresión (4.1), es decir,

$$\psi^{st} = \psi_0(p_0, s_0) + \left(\frac{\partial \psi}{\partial s} \right)_{p=p_0} \frac{ds}{dy} y + \left(\frac{\partial \psi}{\partial p} \right)_{s=s_0} \frac{dp}{dy} y. \quad (6.21)$$

Como una primer aproximación, si se supone que en el estado estacionario los cambios de las variables ψ respecto de la entropía específica son despreciables, en (6.21) $(\partial \psi / \partial s)_{p=p_0} = 0$, por lo que se simplifica como

$$\psi^{st} = \psi_0(p_0, s_0) - \nabla p \left(\frac{\partial \psi}{\partial p} \right)_{s=s_0} y, \quad (6.22)$$

la cual tiene la forma del perfil (6.9). En (6.22) $(\partial \psi / \partial p)_{s=s_0}$ ha sido evaluada en la presión promedio p^0 cuando $y = 0$ en el estado de equilibrio (denotado por el superíndice 0). Más aún, si se supone que ρ^{st} y los parámetros materiales $\nu_1^{st}, \nu_2^{st}, \nu_3^{st}, \gamma_1^{st}, K_1^{st}, K_3^{st}$ al ser escritos en la forma (6.22) presentan una variación muy pequeña respecto de la presión, en (6.22) $(\partial \psi / \partial p)_{s=s_0} = 0$, de manera que serán prácticamente constantes e iguales a sus valores en el estado de equilibrio. Por consiguiente, bajo estas consideraciones, las ecuaciones (6.17)-(6.18) pueden escribirse como

$$\rho_0 \frac{\partial}{\partial t} \delta v_x + \rho_0 v_y^0 \nabla_y \delta v_x = -\nabla_j \delta \sigma_{xj}, \quad (6.23)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \delta n_x + v_y^0 \nabla_y \delta n_x = -\delta Y_x, \quad (6.24)$$

en donde $\delta \sigma_{xj}$ y δY_x , están dadas por

$$\delta \sigma_{xj} \equiv \frac{1}{2} \lambda_{kjj}^0 K_{kjjl}^0 \nabla_j \nabla_l \delta n_x - \nabla_z v_y^0 (\nu_3 - \nu_2) \delta_{jy} n_z^0 \delta n_x - (\nu_2 \delta_{jl}^{\perp 0} + \nu_3 n_j^0 n_l^0) \nabla_l \delta v_x, \quad (6.25)$$

$$\delta Y_x \equiv -\frac{1}{2} (\lambda + 1) n_j^0 \delta_{kx} \nabla_j \delta v_x - \frac{1}{\gamma_1} \delta_{xk}^{\perp 0} (K_2 n_p^0 \epsilon_{pkj} n_q^0 \epsilon_{qxl} + K_3 n_j^0 n_l^0 \delta_{kx}) \nabla_l \delta n_x, \quad (6.26)$$

siendo $\delta_{ik}^{\perp 0} = \delta_{ik} - n_i^0 n_k^0$.

Al sustituir en (6.23), (6.24) la corriente y cuasicorriente (6.25), (6.26) y el perfil de velocidades (6.5), las ecuaciones nemáticas transversales toman finalmente la forma

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \delta v_x + \frac{1}{2\rho_0} (\lambda + 1) \nabla_z (K_2 \nabla_y^2 + K_3 \nabla_z^2) \delta n_x - \frac{1}{\rho_0} (\nu_2 \nabla_y^2 + \nu_3 \nabla_z^2) \delta v_x \\ + \frac{1}{\rho_0} \nabla_y \Sigma_{xj} = -\gamma_p \left[\frac{2(\nu_3 - \nu_2)}{\rho_0} b_z \nabla_y \delta n_x - (\tilde{a} - \tilde{b}z^2) \nabla_y \delta v_x \right], \end{aligned} \quad (6.27)$$

con $j = y, z$ y

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \delta n_x - \frac{1}{2}(\lambda + 1) \nabla_z \delta v_x - \frac{1}{\gamma_1} (K_2 \nabla_y^2 + K_3 \nabla_z^2) \delta n_x \\ + \Upsilon_x = -\gamma_p (\tilde{a} - \tilde{b} z^2) \nabla_y \delta n_x. \end{aligned} \quad (6.28)$$

Las ecuaciones (6.27) y (6.28) constituyen un conjunto completo de ecuaciones hidrodinámicas linealizadas estocásticas, pues en ellas se han añadido los ruidos del tensor de esfuerzos Σ_{xj} y del director Υ_x . Si bien dichos ruidos se definieron en el capítulo tres para un estado en equilibrio, siguen siendo válidos dado que se está considerando un estado fuera de equilibrio estacionario [50]; por consiguiente, siguen satisfaciendo las relaciones de fluctuación disipación (2.117)-(2.119), las cuales para el modelo en consideración toman la forma

$$\langle \Sigma_{xj}(\vec{r}, t), \Sigma_{xl}^*(\vec{r}', t') \rangle = 2k_B \nu_{xjxl}^0 T_0 \delta(\vec{r} - \vec{r}') \delta(t - t'), \quad (6.29)$$

$$\langle \Upsilon_x(\vec{r}, t), \Upsilon_x^*(\vec{r}', t') \rangle = \frac{1}{\gamma_1} 2k_B T_0 \delta(\vec{r} - \vec{r}') \delta(t - t'). \quad (6.30)$$

Al aplicar a las ecuaciones (6.27) y (6.28) una transformada de Fourier, similar a la (4.63), con la regla de transformación

$$\tilde{\mathcal{H}}(\vec{k}, \omega) \equiv \frac{1}{(2\pi)^4} \int_{-\infty}^{\infty} \mathcal{H}(\vec{r}, t) e^{-i(\vec{k} \cdot \vec{r} + \omega t)} d\vec{r} dt \quad (6.31)$$

con

$$\mathcal{H}(\vec{r}, t) = \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{\mathcal{H}}(\vec{k}, \omega) e^{i(\vec{k} \cdot \vec{r} + \omega t)} d\vec{k} d\omega, \quad (6.32)$$

se obtiene

$$\hat{\alpha} \delta \tilde{n}_k - \hat{\beta} \delta \tilde{v}_k + \Upsilon_x^k = -i\gamma_p k_y \left[\frac{\tilde{b}}{4q^2} (\delta \tilde{n}_{k-2q} - 2\delta \tilde{n}_k + \delta \tilde{n}_{k+2q}) + \tilde{a} \delta \tilde{n}_k \right] \quad (6.33)$$

y

$$\begin{aligned} -\hat{\chi} \delta \tilde{n}_k + \hat{\epsilon} \delta \tilde{v}_k - \frac{ik_j}{\rho_0} \Sigma_{xj}^k = \gamma_p k_y \left[\frac{i\tilde{b}}{4q^2} (\delta \tilde{v}_{k-2q} - 2\delta \tilde{v}_k + \delta \tilde{v}_{k+2q}) \right. \\ \left. - \frac{i\tilde{b}}{q} \left(\frac{\nu_2 - \nu_3}{\rho_0} \right) (\delta \tilde{n}_{k-q} - \delta \tilde{n}_{k+q}) + \tilde{a} \delta \tilde{v}_k \right], \end{aligned} \quad (6.34)$$

siendo $j = y, z$ y los subíndices $k \pm mq$ en las variables $\delta \tilde{v}_{k \pm mq}$, $\delta \tilde{n}_{k \pm mq}$ son una abreviatura de $\delta \tilde{v}(k_z \pm mq, \omega)$, $\delta \tilde{n}(k_z \pm mq, \omega)$, con $m = 0, 1, 2$. En la deducción de (6.33) y (6.34) se han definido las cantidades

$$\hat{\alpha} \equiv i\omega + \frac{1}{\gamma_1} \hat{k}_k^2, \quad \hat{\beta} \equiv \frac{i}{2}(\lambda + 1)k_z \quad (6.35)$$

$$\hat{\chi} \equiv \frac{1}{2\rho_0} ik_z (\lambda + 1) \hat{k}_k^2, \quad \hat{\epsilon} \equiv i\omega + \hat{\mu}_k^2, \quad (6.36)$$

en donde

$$\hat{k}_k^2 \equiv K_2 k_y^2 + K_3 k_z^2, \quad \hat{\mu}_k^2 \equiv \frac{1}{\rho_0} (\nu_2 k_y^2 + \nu_3 k_z^2). \quad (6.37)$$

Los ruidos en (6.33) y (6.34) satisfacen las relaciones

$$\left\langle \tilde{\Sigma}_{xj}(\vec{k}, \omega), \tilde{\Sigma}_{xl}^*(\vec{k}', \omega') \right\rangle = 2k_B \nu_{xjxl}^0 T_0 \delta(\vec{k} - \vec{k}') \delta(\omega - \omega'), \quad (6.38)$$

$$\left\langle \tilde{\Upsilon}_x(\vec{k}, \omega), \tilde{\Upsilon}_x^*(\vec{k}', \omega') \right\rangle = \frac{1}{\gamma_1} 2k_B T_0 \delta(\vec{k} - \vec{k}') \delta(\omega - \omega'). \quad (6.39)$$

que se obtienen de aplicar la transformada de Fourier a las relaciones (6.29) y (6.30). Debe mencionarse que en la deducción de (6.33) y (6.34) por conveniencia se utilizó $\frac{1}{q} \sin(qz)$ en vez de z para $qz \ll 1$ y se tomó el límite $q \rightarrow 0$, lo cual permitió facilitar el cálculo de la transformada de Fourier. Por último, también se ha simplificado la notación en las ecuaciones (6.33) y (6.34) al indicar únicamente la dependencia en k y al suprimir el subíndice x en las variables fluctuantes $\delta\tilde{n}_x(\vec{k}, \omega)$ y $\delta\tilde{v}_x(\vec{k}, \omega)$.

6.4. Factor de estructura dinámico

El tensor dieléctrico de un nemático está determinado por la forma general (3.16). Dado que estamos tomando en cuenta únicamente variables transversales, al considerar que la orientación inicial de \hat{n}^{st} es a lo largo del eje z , así como $\hat{i} \perp P$ y $\hat{f} \parallel P$, se encuentra que $\left\langle \delta\epsilon_{if}(\vec{k}, t) \delta\epsilon_{if}^*(\vec{k}, 0) \right\rangle = \left\langle \delta n_x(\vec{k}, t) \delta n_x^*(\vec{k}, 0) \right\rangle$ [60], [71]. En consecuencia, de acuerdo con (3.10), en este caso la densidad espectral de la luz dispersada puede escribirse como

$$\chi(\vec{k}, \omega) = \frac{\vec{k}_f^4 |E_0|^2}{16\pi^2 R^2 \epsilon_0^2} \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \left\langle \delta n_x(\vec{k}, t) \delta n_x^*(\vec{k}, 0) \right\rangle \exp(-i\omega t) dt. \quad (6.40)$$

Obsérvese que $\chi(\vec{k}, \omega)$ resulta proporcional a la densidad espectral

$$\hat{\chi}(\vec{k}, \omega) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \left\langle \delta n_x(\vec{k}, t) \delta n_x^*(\vec{k}, 0) \right\rangle \exp(-i\omega t) dt, \quad (6.41)$$

que es equivalente a $I_{if}^{\epsilon}(\vec{k}, \omega)$ dada por (3.11). En la Subsección 3.2.3. se identificó a $I_{if}^{\epsilon}(\vec{k}, \omega)$ con el factor de estructura dinámico $S(\vec{k}, \omega)$. No obstante, para ser consistentes con las referencias [60], [71], en este capítulo identificaremos a $S(\vec{k}, \omega)$ directamente con $\chi(\vec{k}, \omega)$ dada por (6.40) y así lo denotaremos.

6.4.1. Aproximación perturbativa

El miembro derecho de las ecuaciones (6.33) y (6.34) contienen toda la información de los efectos de no equilibrio debidos al gradiente de presión externo a través de la presencia del parámetro adimensional γ_p , el cual cuantifica el grado de alejamiento del sistema respecto a su estado de equilibrio. Con el propósito de calcular la función de correlación del integrando de (6.40), resulta conveniente hacer un desarrollo perturbativo en serie de potencias del parámetro γ_p de las fluctuaciones $\delta\tilde{n}_k$ y $\delta\tilde{v}_k$; es decir,

$$\delta\tilde{n}_k = \delta n_k(\vec{k}, \omega) \equiv \delta\tilde{n}_{k\omega} = \delta\tilde{n}_{k\omega}^0 + \gamma_p \delta\tilde{n}_{k\omega}^1 + \dots, \quad (6.42)$$

$$\delta\tilde{v}_k = \delta v_k(\vec{k}, \omega) \equiv \delta\tilde{v}_{k\omega} = \delta\tilde{v}_{k\omega}^0 + \gamma_p \delta\tilde{v}_{k\omega}^1 + \dots. \quad (6.43)$$

en donde el super índice $(^0)$ indica la solución a orden cero o de equilibrio, y el superíndice $(^1)$ denota a la solución de orden uno o lineal. Por consiguiente, la función de autocorrelación requerida toma la forma

$$\langle \delta n_{k\omega} \delta n_{k'\omega'}^* \rangle = \langle \delta n_{k\omega}^0 \delta n_{k'\omega'}^{0*} \rangle + \gamma_p [\langle \delta n_{k\omega}^0 \delta n_{k'\omega'}^{1*} \rangle + \langle \delta n_{k\omega}^1 \delta n_{k'\omega'}^{0*} \rangle], \quad (6.44)$$

y el espectro de dispersión de luz $\chi(\vec{k}, \omega)$ posee componentes de equilibrio $\chi^{eq}(\vec{k}, \omega)$ y de no equilibrio $\chi^{neq}(\vec{k}, \omega)$

$$\chi(\vec{k}, \omega) = \chi^{eq}(\vec{k}, \omega) + \gamma_p \chi^{neq}(\vec{k}, \omega). \quad (6.45)$$

Se calculará primero la contribución de equilibrio. Si se considera que $\gamma_p = 0$ en (6.33) y (6.34), y se utilizan (6.42) y (6.43) se obtiene

$$\delta \tilde{n}_k^0 = A_{\omega k} \tilde{\Upsilon}_x^k + B_{\omega k} k_j \tilde{\Sigma}_{xj}^k \quad (6.46)$$

$$\delta \tilde{v}_k^0 = C_{\omega k} \tilde{\Upsilon}_x^k + D_{\omega k} k_j \tilde{\Sigma}_{xj}^k, \quad (6.47)$$

siendo $j = y, z$ y en donde

$$A_{\omega k} \equiv \frac{\hat{\epsilon}}{\hat{\beta}\hat{\chi} - \hat{\alpha}\hat{\epsilon}} = -\frac{1}{\bar{\Gamma}} \left[\hat{\mu}_k^2 (\hat{\lambda}_k^4 + \hat{\xi}_k^2 \hat{\mu}_k^2) + \omega^2 \hat{\xi}_k^2 + i\omega (\hat{\lambda}_k^4 - \hat{\mu}_k^2 \hat{\mu}_k^2 - \omega^2) \right], \quad (6.48)$$

$$B_{\omega k} \equiv \frac{i\hat{\beta}}{\rho_0 (\hat{\beta}\hat{\chi} - \hat{\alpha}\hat{\epsilon})} = \frac{(\lambda + 1)k_z}{2\bar{\Gamma}\rho_0} \left[(\hat{\lambda}_k^4 + \hat{\xi}_k^2 \hat{\mu}_k^2 - \omega^2) - i\omega (\hat{\xi}_k^2 + \hat{\mu}_k^2) \right], \quad (6.49)$$

$$C_{\omega k} \equiv \frac{\hat{\chi}}{\hat{\beta}\hat{\chi} - \hat{\alpha}\hat{\epsilon}} = -i\hat{k}_k^2 B_{\omega k}, \quad (6.50)$$

$$D_{\omega k} \equiv \frac{i\hat{\alpha}}{\rho_0 (\hat{\beta}\hat{\chi} - \hat{\alpha}\hat{\epsilon})} = \frac{1}{\bar{\Gamma}\rho_0} \left\{ \omega (\hat{\lambda}_k^4 - \hat{\xi}_k^2 \hat{\mu}_k^2 - \omega^2) - i \left[\hat{\xi}_k^2 (\hat{\lambda}_k^4 + \hat{\xi}_k^2 \hat{\mu}_k^2) + \omega^2 \hat{\mu}_k^2 \right] \right\}, \quad (6.51)$$

con

$$\bar{\Gamma} \equiv \left(\hat{\lambda}_k^4 + \hat{\xi}_k^2 \hat{\mu}_k^2 - \omega^2 \right)^2 + \omega^2 \left(\hat{\xi}_k^2 + \hat{\mu}_k^2 \right)^2 \quad (6.52)$$

y

$$\hat{\xi}_k^2 \equiv \frac{1}{\gamma_1} \hat{k}_k^2, \quad \hat{\lambda}_k^4 \equiv \bar{\lambda}^2 k_z^2 \hat{k}_k^2, \quad \bar{\lambda}^2 \equiv \frac{1}{4\rho_0} (\lambda + 1)^2. \quad (6.53)$$

Por consiguiente, a partir de (6.44) y (6.46) se obtiene la contribución de equilibrio

$$\chi^{eq}(\vec{k}, \omega) = 2k_B T_0 \left[\frac{1}{\gamma_1} |A_{\omega k}|^2 + \rho_0 \hat{\mu}_k^2 |B_{\omega k}|^2 \right]. \quad (6.54)$$

Similarmente, la contribución de no equilibrio se halla resolviendo el sistema formado por (6.42) y (6.43) para $\delta \tilde{n}_k^1$ y $\delta \tilde{v}_k^1$, obteniéndose

$$\delta \tilde{n}_k^1 = k_y \left\{ iA_{\omega k} \left[\frac{\tilde{b}}{4q^2} (\delta \pi_{k-2q} - 2\delta \pi_k + \delta \pi_{k+2q}) + \tilde{a} \delta \pi_k \right] + \rho_0 B_{\omega k} \left[\frac{\tilde{b}}{4q^2} (\delta \sigma_{k-2q} - 2\delta \sigma_k + \delta \sigma_{k+2q}) - \frac{i\tilde{b}}{q\rho_0} (\nu_3 - \nu_2) (\delta \pi_{k-q} - \delta \pi_{k+q}) + \tilde{a} \delta \sigma_k \right] \right\} \quad (6.55)$$

y

$$\delta\tilde{v}_k^1 = k_y \left\{ iC_{\omega k} \left[\frac{\tilde{b}}{4q^2} (\delta\pi_{k-2q} - 2\delta\pi_k + \delta\pi_{k+2q}) + \tilde{a}\delta\pi_k \right] + \rho_0 D_{\omega k} \left[\frac{\tilde{b}}{4q^2} (\delta\sigma_{k-2q} - 2\delta\sigma_k + \delta\sigma_{k+2q}) - \frac{i\tilde{b}}{q\rho_0} (\nu_3 - \nu_2) (\delta\pi_{k-q} - \delta\pi_{k+q}) + \tilde{a}\delta\sigma_k \right] \right\}, \quad (6.56)$$

en donde se ha definido

$$\delta\pi_{k\pm mq} \equiv A_{\omega, k\pm mq} \tilde{\Upsilon}_x(k \pm mq) + (k_j \pm mq) B_{\omega, k\pm mq} \tilde{\Sigma}_{xj}(k \pm mq) \quad (6.57)$$

$$\delta\sigma_{k\pm mq} \equiv C_{\omega, k\pm mq} \tilde{\Upsilon}_x(k \pm mq) + (k_j \pm mq) D_{\omega, k\pm mq} \tilde{\Sigma}_{xj}(k \pm mq), \quad (6.58)$$

con $m = 0, 1, 2$ y $j = y, z$. De esta manera, a partir de las ecuaciones (6.40), (6.44), (6.46) y (6.55) tenemos finalmente que la contribución de no equilibrio es

$$\chi^{neq}(\vec{k}, \omega) = \tilde{a}k_y \left\{ i\chi^{eq}(\vec{k}, \omega) [(A_{\omega k} - A_{\omega k}^*)] + \rho_0 \left[\frac{1}{\gamma_1} (A_{\omega k}^* B_{\omega k} C_{\omega k} + (A_{\omega k}^* B_{\omega k} C_{\omega k})^*) + \rho_0 \hat{\mu}_k^2 |B_{\omega k}|^2 (D_{\omega k} + D_{\omega k}^*) \right] \right\}, \quad (6.59)$$

en donde $\hat{\mu}_k^2$ está dada por (6.37) y el superíndice * denota complejo conjugado. No obstante la compleja dependencia de las ecuaciones (6.54) y (6.59) respecto de la variable k , partiendo de las diversas definiciones de las cantidades que en ellas están involucradas y que se han definido con anterioridad, resulta posible estimar las dependencias de estas contribuciones de equilibrio y de no equilibrio respecto a dicha variable: $\chi^{eq}(\vec{k}, \omega) \sim k^{-4}$ y $\chi^{neq}(\vec{k}, \omega) \sim k^{-5}$. Nótese que lo anterior refleja que δn_x es una cantidad no conservada. De hecho, es bien conocido que para una muestra de fluido simple bajo la acción de un gradiente de temperatura [19], [136], la cual depende sólo de variables conservadas, la dependencia en k de las contribuciones de equilibrio y de no equilibrio al espectro varían como k^{-2} y k^{-4} respectivamente. Es evidente que la dependencia explícita en k de la contribución de equilibrio (6.54) y de no equilibrio (6.59) es sumamente complicada; de modo que para obtener expresiones analíticas de dichos términos que muestren explícitamente tal dependencia, resulta conveniente hacer aproximaciones basadas en la comparación entre los parámetros materiales involucrados en (6.54) y (6.59) para hallar una simplificación de estas ecuaciones, tal como se mostrará en la siguiente subsección.

En la gran mayoría de los cristales líquidos nemáticos termótropos de bajo peso molecular, se ha hallado experimentalmente que la relajación de la viscosidad es mucho más rápida que la orientacional debida al director [46]; es decir,

$$\frac{\hat{\xi}_k^2}{\hat{\mu}_k^2} = \frac{(1/\gamma_1)\hat{k}_k^2}{\hat{\mu}_k^2} \equiv \frac{(1/\gamma_1)(K_3 k_z^2 + K_2 k_y^2)}{(1/\rho_0)(\nu_3 k_z^2 + \nu_2 k_y^2)} \ll 1, \quad (6.60)$$

en donde se ha usado (6.37), lo que implica que

$$\hat{\mu}_k^2 \hat{\mu}_k^2 \gg \hat{\lambda}_k^4, \quad (6.61)$$

como puede verse a partir de (6.53). Debido a que típicamente en nemáticos $\widehat{\mu}_k^2 \simeq 9.2 \times 10^5 \text{ s}^{-1}$, para valores bajos del corrimiento de frecuencias ω tenemos

$$\frac{\omega^2}{\widehat{\mu}_k^2} \ll 1. \quad (6.62)$$

Al tomar en consideración las desigualdades (6.60)-(6.62) en (6.54) y (6.59) se obtienen las siguientes expresiones simplificadas para $\chi^{eq}(\vec{k}, \omega)$ y $\chi^{neq}(\vec{k}, \omega)$ en las que se muestra explícitamente su dependencia con k

$$\chi^{eq}(\vec{k}, \omega) = 2k_B T_0 \frac{1}{\widehat{k}_k^2} \frac{\widehat{\omega}}{\widehat{\omega}^2 + \omega^2} \quad (6.63)$$

y

$$\chi^{neq}(\vec{k}, \omega) = -k_B T_0 \frac{\nu_3}{2\rho_0 d} \frac{k_y}{\widehat{k}_k^2} \frac{\widehat{\omega}\omega}{(\widehat{\omega}^2 + \omega^2)^2}, \quad (6.64)$$

con

$$\widehat{\omega} \equiv \frac{1}{\gamma_1} \widehat{k}_k^2 + \frac{\widehat{\lambda}_k^4}{\widehat{\mu}_k^2}. \quad (6.65)$$

Si tomamos en consideración el hecho de que δn_x no es una variable conservada, entonces $\omega \sim k^2$; por lo tanto, se sigue de las expresiones anteriores que $\chi^{eq} \sim k^{-4}$, $\chi^{neq} \sim k^{-5}$, lo cual concuerda con los resultados exactos.

6.5. Espectro de dispersión

A continuación se calculará la componente polarizada V - H del factor de estructura dinámico, de acuerdo al esquema indicado en la Figura 3.2 de la Subsección 3.2.1.

6.5.1. Geometría de dispersión V - H

En este caso se supondrá que $\hat{i} \perp P$ y $\hat{f} \parallel P$ (ver Figura 6.1). Al normalizar las ecuaciones (6.63) y (6.64) utilizando $\chi^{eq}(\vec{k}, 0)$ y al introducir la cantidad adimensional $\widetilde{\omega} \equiv \omega/\widehat{\omega}$, se tiene que el espectro puede escribirse también en la forma adimensional

$$\begin{aligned} S(\widetilde{\omega}) &= S^{eq}(\widetilde{\omega}) + S^{neq}(\widetilde{\omega}) \\ &= \frac{1}{1 + \widetilde{\omega}^2} \left[1 - |\nabla\pi| \frac{\widetilde{\omega}}{1 + \widetilde{\omega}^2} \right], \end{aligned} \quad (6.66)$$

en donde se ha definido al gradiente adimensional

$$|\nabla\pi| \equiv \gamma_p \frac{\nu_3}{4\rho_0 d} \frac{k_y}{\widehat{\omega}}. \quad (6.67)$$

Puede verse de los resultados anteriores que la contribución de equilibrio $\chi^{eq}(\vec{k}, \omega)$ es una lorentziana con su máximo localizado en $\widetilde{\omega} = 0$. La presencia del gradiente de presiones produce una asimetría en el espectro, de manera que el máximo del factor de estructura experimenta un desplazamiento respecto a su posición de equilibrio. Para calcular la magnitud de este corrimiento en términos del gradiente de presiones externo

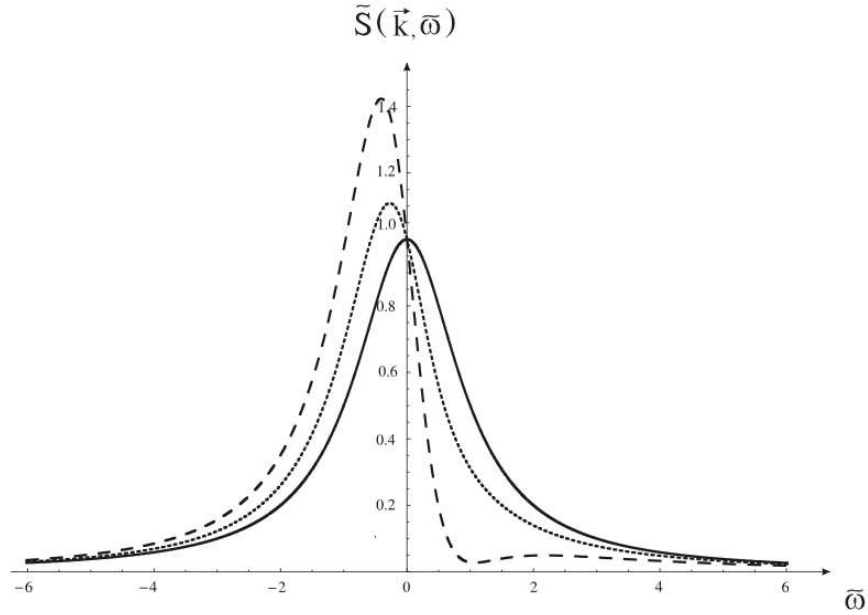


Figura 6.2: Factor de estructura dinámico normalizado $\tilde{S}(\vec{k}, \tilde{\omega})$ como una función de la frecuencia angular normalizada $\tilde{\omega}$, para una capa nemática de MBBA bajo la presencia de un gradiente de presión ∇p . Para $k_i = 1.14 \times 10^5 \text{ cm}^{-1}$ y $\theta \sim 1^\circ$, se consideraron los gradientes de presión reales $\nabla p = 0$ (línea continua), $\nabla p = 0.1 \text{ atm/cm}$ (línea punteada) y $\nabla p = 0.25 \text{ atm/cm}$ (línea discontinua).

$|\nabla\pi|$, hagamos $dS(\tilde{\omega})/d\tilde{\omega} = 0$, lo cual nos permite hallar la posición del máximo de $S(\tilde{\omega})$ como una función de $|\nabla\pi|$ a través de la ecuación cúbica

$$\tilde{\omega}^3 - \frac{3}{2} |\nabla\pi| \tilde{\omega}^2 + \tilde{\omega} + \frac{1}{2} |\nabla\pi| = 0, \quad (6.68)$$

que presenta dos raíces imaginarias y una real. Puede mostrarse que la solución real $\tilde{\omega}_r$ toma el valor $\tilde{\omega}_r = -\frac{1}{2} |\nabla\pi|$ en el intervalo ± 0.1 .

Con la finalidad de hallar el espectro de dispersión de luz, consideraremos al nemático termótropo MBBA, cuyos parámetros se señalan en la Tabla E.1 del Apéndice E. Supondremos que la separación entre las placas es $d = 8 \times 10^{-3} \text{ cm}$, el haz incidente tiene un vector de onda $k_i = 1.14 \times 10^5 \text{ cm}^{-1}$ y un ángulo de dispersión de luz $\theta \sim 1^\circ$. Tomaremos en cuenta diferentes grados de alejamiento del equilibrio del espectro de dispersión a través de las siguientes magnitudes del gradiente adimensional: $\gamma_p = 0.1$ y $\gamma_p = 0.25$, que de acuerdo con la definición (6.4) corresponden, respectivamente, a los gradientes de presión reales $|\nabla p| = 1.06 \times 10^{-2} \text{ atm/cm}$ y $|\nabla p| = 2.64 \times 10^{-2} \text{ atm/cm}$.

Con base en los valores señalados y mediante (6.66) se obtienen los diferentes espectros de luz que se muestran en la Figura 6.2. Allí, se hace una comparación entre el espectro de dispersión en el estado de equilibrio χ^{eq} , para el cual $\gamma_p = 0$ (con línea continua), con los espectros fuera del equilibrio $\chi^{eq} + \chi^{neq}$ para los cuales $\gamma_p = 0.1$ (línea punteada) y $\gamma_p = 0.25$ (línea discontinua). Al observar esta figura, se aprecia que

para este valor de γ_p seleccionado, la diferencia entre ambas curvas es prácticamente nula; sin embargo, esta gráfica muestra que para el modelo en consideración, el gradiente externo tiende a incrementar la altura y la desviación del espectro completo mediante corrimientos negativos de ω . Dichas desviaciones pueden cuantificarse al definir la cantidad

$$\Delta(\vec{k}, \omega) \equiv \frac{|\chi^{neq}(\vec{k}, \omega)|}{\chi^{eq}(\vec{k}, \omega)} = \gamma_p \frac{\nu_3}{8\rho_0 d} k_y \frac{\omega}{\tilde{\omega}^2 + \omega^2}. \quad (6.69)$$

en la cual el máximo valor que alcanza esta función, para un valor fijo de \vec{k} , se produce cuando $\omega^* = \pm \tilde{\omega}$ o $\tilde{\omega}^* = \pm 1$. Al emplear las cantidades adimensionales:

$$\Delta^*(\tilde{\omega}^*) = \gamma_p \frac{\nu_3}{32\rho_0 d} \frac{k_y}{\tilde{\omega}} = \frac{1}{8} |\nabla\pi|, \quad (6.70)$$

en donde Δ^* mide el el efecto de no equilibrio máximo del espectro de dispersión. Por otra parte, $\tilde{\omega}_{\text{máx}}$ es la frecuencia para la cual $S(\tilde{\omega} = \tilde{\omega}_{\text{máx}})$ alcanza su máximo. Comparando ésta con el tamaño del pico en equilibrio, se obtiene la diferencia

$$\Psi \equiv \frac{S(\tilde{\omega} = \tilde{\omega}_{\text{máx}}) - S^{eq}(\tilde{\omega} = 0)}{S^{eq}(\tilde{\omega} = 0)}. \quad (6.71)$$

Al realizar este análisis para los valores $\gamma_p = 0.1$ y $\gamma_p = 0.25$, se obtienen los valores $\Delta^* = 37.73\%$ y $\Delta^* = 94.3\%$. Cabe señalar que esta última representa un incremento significativamente mayor que la primera.

Conclusiones

Este trabajo de investigación consistió principalmente de dos etapas: en la primera, se formuló una teoría hidrodinámica fluctuante de cristales líquidos nemáticos termótropos, denominada nematodinámica fluctuante; en tanto que en la segunda, se realizaron diversas aplicaciones de la misma, en particular, en el estudio de los espectros de dispersión de luz de una capa nemática en distintos estados estacionarios de no equilibrio termodinámico y en el cálculo de modos hidrodinámicos en equilibrio y fuera de equilibrio. En ambas partes se encuentran aportaciones originales de nuestro trabajo. A continuación, de acuerdo con los resultados obtenidos, se hace una discusión de los mismos y se muestran las conclusiones más relevantes que a nuestro juicio de ellos se desprenden.

Para desarrollar la nematodinámica fluctuante, fue necesario partir de las ecuaciones hidrodinámicas de un nemático, que constituyen la denominada nematodinámica. Si bien dichas ecuaciones deterministas están bien establecidas, los enfoques para su deducción son muy diversos y se encuentran dispersos en la literatura. Por tal motivo, se consideró útil hacer una revisión de los mismos y mostrar detalles en la deducción de las ecuaciones de conservación, de balance y de rompimiento de simetría que son relevantes y que generalmente no se discuten. De esta manera, tal como se mencionó en la Introducción, se deducen de una manera clara y consistente las ecuaciones de conservación, de balance y de rompimiento de simetría de un nemático de bajo peso molecular, tomando en consideración argumentos fundamentales de simetrías y de la termodinámica de procesos fuera del equilibrio.

A partir de esta revisión se formula la nematodinámica fluctuante siguiendo el enfoque de la teoría de Fox y Uhlenbeck, consistente con la teoría de procesos estocásticos gaussianos [6], [53], [137]. Esta formulación representa la primera contribución original de esta tesis. Se deducen de una manera sistemática las ecuaciones hidrodinámicas fluctuantes de un nemático a partir de la teoría de procesos estocásticos generalizada. Debe señalarse que los sistemas físicos que han sido descritos con esta teoría son muy escasos, entre los que pueden mencionarse el movimiento browniano de un oscilador armónico, las fluctuaciones en un fluido simple y la ecuación de Boltzmann fluctuante. Aquí se muestra que las fluctuaciones térmicas de un fluido complejo como lo es un cristal líquido nemático, también pueden describirse mediante el formalismo de Fox y Uhlenbeck. Esto representa una aplicación altamente no trivial de dicho formalismo, a un sistema mucho más complicado que los hasta entonces reportados. Es precisamente mediante el empleo de este esquema teórico, que pueden

deducirse de una manera coherente y sistemática, las relaciones de fluctuación-disipación para este tipo de fluidos complejos.

Como parte de algunas de las aplicaciones que pueden hacerse del conjunto de ecuaciones nemáticas fluctuantes linealizadas obtenidas se calculan primero los modos hidrodinámicos de una capa nemática en un estado estacionario de no equilibrio correspondiente al de un sistema de Rayleigh-Bénard señalado con anterioridad. El análisis realizado toma en consideración únicamente el régimen no convectivo. Para ello se emplea un nuevo sistema de coordenadas, el cual toma en consideración las propiedades de simetría del nemático y permite separar sus variables hidrodinámicas en dos conjuntos completamente independientes entre sí: uno longitudinal, integrado por cinco variables, y otro transversal, constituido sólo por dos variables. Se muestra que el conjunto de variables longitudinales puede separarse a su vez también en dos conjuntos independientes entre sí: uno integrado por dos variables rápidas y otro formado por tres variables lentas. De las ecuaciones que gobiernan la dinámica de las variables longitudinales rápidas se obtienen los dos modos de propagación acústicos λ_1 y λ_2 (ecuaciones (4.118) y (4.119)). La dinámica de las variables longitudinales lentas da lugar a tres modos hidrodinámicos: dos denominados visco-calóricos, λ_3 y λ_4 (ecuación (4.134)), resultado del acoplamiento de los modos difusivo térmico y de cizalla ocasionado por la presencia de α y g ; y uno más de carácter difusivo, λ_5 (ecuación (4.135)), relacionado con la orientación del director. Por último, del conjunto de variables transversales se desprenden dos modos hidrodinámicos transversales difusivos, λ_6 y λ_7 (ecuaciones (4.160) y (4.161)), debidos a la orientación del director y al flujo de corte. En total se encuentran siete modos hidrodinámicos nemáticos λ_i : cinco longitudinales ($i = 1, \dots, 5$) y dos transversales ($i = 6, 7$).

Encontramos que el efecto más significativo debido a la presencia de las fuerzas externas α y g se presenta en los modos λ_3 y λ_4 , el cual es pequeño ($\sim 10^{-9}$). En contraste, para λ_1 y λ_2 , g produce una influencia mucho menor la cual es, presumiblemente, indetectable experimentalmente. Debe mencionarse que nuestros tres modos λ_3 , λ_4 , λ_5 , no coinciden con los ya reportados en la literatura [65], [66], los cuales son un modo de corte y dos más debidos al acoplamiento de los modos térmico y de orientación del director. No obstante que estos modos reportados se reducen a los modos correspondientes de cizalla, térmico y de orientación del director para un cristal líquido nemático en el estado de equilibrio termodinámico, no coinciden con aquellos obtenidos en otros trabajos de investigación para las dos situaciones límite siguientes: Primera, cuando es considerado el umbral de convección en un fluido simple, no se reducen a los correspondientes resultados teóricos ya reportados por otros autores, [62], [63], [64]. Segunda, para fluidos simples, no predicen la existencia de modos propagativos visco-calóricos, los cuales han sido predichos tanto teórica como experimentalmente [133].

Respecto a nuestros modos λ_3 , λ_4 y λ_5 , la naturaleza de los dos primeros puede ser difusiva o propagativa. Además, en el límite del fluido simple, λ_3 , λ_4 coinciden con las ecuaciones (2.22) y (11) dadas, respectivamente, en las referencias [62] y [63]. Los modos visco-calóricos λ_3 y λ_4 se escriben en términos del cociente de Rayleigh R/R_c , en donde R es el número de Rayleigh y R_c el valor que éste alcanza cuando en el sistema

nemático inicia la convección. El análisis desarrollado correspondiente al régimen no convectivo se cumple bajo la condición $R/R_c \leq 1$. La existencia de λ_3 y λ_4 representa otro de los resultados originales de la tesis, dado que dependiendo de los valores que tome el cociente R/R_c , pueden ser difusivos o propagativos.

Las expresiones analíticas para los modos nematodinámicos encontradas en este trabajo de investigación, son más generales que aquellas reportadas en la literatura anteriormente en el sentido siguiente. Primero, cuando $R = 0$ nuestras expresiones se reducen a aquellas correspondientes ya reportadas para un nemático en el estado de equilibrio termodinámico [3], [44], [52]. En el límite isótropo de un cristal líquido nemático, nuestros resultados también se reducen a los de un fluido simple, [1], [63], [64]. Cuando $R = R_c$, nuestras expresiones para los modos también dan lugar a los modos hidrodinámicos nemáticos cerca del valor crítico. Más específicamente, el comportamiento de las tasas de decaimiento λ_3 y λ_4 no coinciden con las reportadas en la literatura para un cristal líquido nemático [66], [65]. En estos trabajos previos el modo del director tiende a cero, el modo de corte no cambia y se tiene un modo adicional resultado de la suma de los modos térmico y del director. En contraste, hemos encontrado que λ_3 se anula, λ_5 virtualmente no cambia, en tanto que λ_4 posee contribuciones de los modos difusivos térmico y de cizalla. Sabemos que este fenómeno también ocurre en un fluido simple, donde hay dos modos difusivos, el modo térmico también se anula y el otro tiene contribuciones de los modos térmico y de corte, [63], [64]. Por consiguiente, nuestros resultados se reducen a los correspondientes para un fluido simple conforme R alcanza su valor crítico R_c . Cuando $R/R_c \lesssim -10^1$, nuestros resultados predicen la existencia de dos modos propagativos visco-calóricos, λ_3 y λ_4 . Hasta donde sabemos, este comportamiento no ha sido reportado anteriormente, [65], [66]. De esta manera, dado que en fluidos simples ha sido predicha y verificada experimentalmente la existencia de modos propagativos, nuestras predicciones para el comportamiento de los modos de un cristal líquido nemático sugieren la realización de nuevos experimentos en los que éste podría verificarse.

Las ecuaciones nematodinámicas fluctuantes calculadas también se aplicaron en el cálculo del espectro de dispersión de Rayleigh de una capa nemática en el mismo estado estacionario de no equilibrio correspondiente a un sistema de Rayleigh-Bénard. De acuerdo a los resultados de nuestro análisis, llegamos a las siguientes conclusiones. Como ya se ha mencionado, la presencia de las fuerzas externas α y g produce dos modos visco-calóricos que resultan del acoplamiento de los modos difusivos térmico y de corte mediante el cociente $R(\vec{k})/R_c$. Cuando únicamente el gradiente de temperatura α está presente, los modos visco-calóricos están desacoplados y no se observan cambios en el espectro, que básicamente es el mismo que en el estado de equilibrio. Sin embargo, la presencia de esta fuerza externa produce cambios en la intensidad del espectro de Rayleigh que son inversamente proporcionales a la cuarta potencia del vector de onda k y directamente proporcionales al cuadrado del gradiente de temperatura α aplicado. Esta dependencia k^{-4} indica que las fluctuaciones están correlacionadas a largo alcance aún cuando la capa nemática sea calentada desde abajo en un estado estacionario de equilibrio alejado de la región de inestabilidad convectiva. Si bien hasta donde sabemos no existen, como en fluidos simples [33], experimentos que permitan medir estos efectos en cristales líquidos nemáticos, nuestros resultados sugieren la realización de nuevos experimentos de este tipo.

Por otra parte, cuando sólo el campo gravitacional g está presente, la forma del espectro aún se mantiene conforme los ángulos de dispersión decrecen, excepto cuando $R(\vec{k})/R_c$ empieza a estar debajo de $R_0(\vec{k})$, y la naturaleza propagativa de los modos visco-calóricos es cada vez más evidente. En esta situación empieza a manifestarse la existencia de dos picos localizados simétricamente a ambos lados de la lorentziana de mayor intensidad. Este par de picos está desplazado respecto del central e incrementa su altura conforme el ángulo de dispersión decrece. Además, cuando ambas fuerzas externas están presentes y se consideran las dos posibles direcciones del gradiente de temperatura, sólo el calentamiento desde abajo produce un efecto similar en el espectro al descrito cuando únicamente está presente el campo gravitacional. Es importante observar que los valores requeridos del ángulo de dispersión en este caso para que los modos de visco-calóricos puedan ser propagativos, son dos órdenes de magnitud más pequeños que los requeridos para producirlos cuando sólo está presente el campo gravitacional. Además, esta comparación muestra que la intensidad del espectro en ambos casos difiere en un orden de magnitud, siendo menor cuando tenemos las dos fuerzas externas.

Encontramos que el espectro de Rayleigh muestra una base ancha con una altura de cuatro órdenes de magnitud menor que el pico unitario. Esta deformación se debe completamente a las fluctuaciones de la entropía y parece ser lo que se conoce como alas de Rayleigh [93]. También encontramos que estas alas Rayleigh están aún presentes en ausencia de un gradiente de temperatura. Sin embargo, conforme se aplica un gradiente de temperatura al cristal líquido nemático, notamos que las alas Rayleigh comienzan a ensancharse y reducir su altura. A nuestro entender, la existencia de las alas de Rayleigh es un efecto debido a las fluctuaciones orientacionales en el líquido producida por sus moléculas anisótropas. De acuerdo con la referencia [93], en estudios de cristales líquidos de dinámicas orientacionales moleculares individuales se ha encontrado que la escala de tiempo de relajación es del orden de los picosegundos. Esto explica por qué en el espectro las alas de Rayleigh son bastante anchas.

Se ha mostrado que para un cristal líquido nemático la presencia del gradiente de temperatura y del campo gravitatorio externo induce un acoplamiento entre modos hidrodinámicos que conduce a correlaciones de largo alcance entre los campos fluctuantes. Esto fue posible porque se utilizó una extensión de hidrodinámica fluctuante a una capa nemática bajo este estado de no equilibrio basado en la suposición de que las relaciones de fluctuación-disipación entre los flujos disipativos aleatorios son idénticas a sus correspondientes teoremas en el estado de equilibrio termodinámico. Sin embargo, como se señala en la referencia [64] para fluidos simples, también en esta extensión de la hidrodinámica fluctuante se pueden identificar dos fuentes que hacen que las fluctuaciones en los estados de no equilibrio sean de largo alcance: Una primera fuente se debe a la dependencia espacial de las correlaciones de ruido resultantes de la aplicación local de las relaciones de fluctuación-disipación. Por ejemplo, esto se puede apreciar en las ecuaciones (A.8) a (A.18) para las funciones de autocorrelación de los ruidos ζ_3 , ζ_4 y ζ_5 que, en nuestro caso de no equilibrio, dependen de la transformada de Fourier del perfil de temperatura de (4.2) dado por la ecuación (A.19). Esta fuente de efectos de no equilibrio se denomina como *ruido térmico correlacionado inhomogéneamente*. La segunda fuente es

causada por la presencia del fenómeno de acoplamiento de modos en fluidos fuera del estado de equilibrio termodinámico. Los estados de equilibrio se caracterizan por la presencia de flujos termodinámicos promedio diferentes de cero que causan acoplamientos entre los modos hidrodinámicos. Esta última fuente de efectos de no equilibrio se conoce como *acoplamiento de modos*.

Debe destacarse que hemos propuesto formas adicionales de comparar las predicciones de nuestra teoría con el experimento utilizando dispersión de Rayleigh, aparte del espectro mismo, a través de las amplitudes de las fluctuaciones de no equilibrio $E_i^{neq}(\vec{k})$, $i = 3, 4, 5$. Además, con esta misma técnica, la comparación entre la teoría y el experimento podría hacerse en términos de $\tilde{I}^{dif}(\vec{k}, t)$, como se discute en la Sección 5.5 del Capítulo 5.

Por otra parte, el uso de otras técnicas experimentales como la *dispersión forzada de Rayleigh*, daría la posibilidad de comparar los valores teóricos y experimentales de $I^{prop}(\vec{k}, t)$. Sin embargo, no tenemos conocimiento de la existencia de resultados experimentales en este sentido.

La última aplicación de la nematodinámica fluctuante que se hace en esta tesis, consiste en el cálculo del espectro de dispersión de un nemático bajo un gradiente de presión. Dada la complejidad inherente de esta problemática, el análisis realizado sólo se limita al estudio de las variables transversales. No obstante, en este caso se encuentra que los efectos en el espectro de dispersión de luz son muy grandes y mucho mayores que los producidos por otro tipo de gradientes externos [57] y que han sido reportados hasta la fecha. Debe enfatizarse que la contribución fuera de equilibrio es una función impar de ω la cual introduce una asimetría en la forma del factor de estructura que se traduce en un corrimiento del máximo en la región de valores negativos de ω . Sin embargo, se tiene la certeza de que el gradiente considerado garantiza un flujo estable sin la presencia de efectos de convección o de turbulencia, ya que si bien hasta donde sabemos no existen experimentos de dispersión de luz bajo estas condiciones en nemáticos termótropos, si se tiene evidencia de experimentos en los que se han producido flujos estables de tipo Poiseuille en celdas nemáticas con gradientes de presión que están en concordancia con los órdenes de magnitud de los gradientes considerados en nuestra investigación. Las dependencias halladas de las contribuciones de equilibrio y no equilibrio con respecto a \vec{k} son $\chi^{eq} \sim k^{-4}$ y $\chi^{neq} \sim k^{-5}$ respectivamente, y son comparables con las encontradas para el caso fuera de equilibrio producido por el gradiente de temperatura; lo anterior indica que en el nemático δn_x no es una variable conservada, pues en el caso de un fluido simple en el que todas sus variables hidrodinámicas son conservadas, las correspondientes dependencias son $\chi^{eq} \sim k^{-2}$ and $\chi^{neq} \sim k^{-4}$.

Finalmente, debemos puntualizar que el análisis realizado sólo concierne al conjunto de variables hidrodinámicas transversales de un cristal líquido nemático, en el que se despreciaron por ejemplo efectos térmicos en el espectro de dispersión de luz que resultan de considerar el conjunto de variables longitudinales $\{\delta p(\vec{r}, t), \delta s(\vec{r}, t), \delta v_y(\vec{r}, t), \delta v_z(\vec{r}, t), \delta n_y(\vec{r}, t)\}$. De esta manera, un análisis completo del espectro de dispersión de luz en esta situación física de no equilibrio requiere considerar también a dicho conjunto longitudinal.

Es menester mencionar que en el cálculo de los espectros de dispersión señalados con anterioridad, se

han considerado las geometrías experimentales más usuales. Si bien no se cuenta hasta ahora con evidencia experimental con la que se pueda comparar directamente los resultados encontrados, al haber realizado nuestras predicciones apegándonos la forma en que se efectúan tradicionalmente este tipo de experimentos, nos permite sugerir y motivar el desarrollo futuro de los mismos.

Aunque no se ha indicado en este trabajo de investigación, mediante el formalismo desarrollado resulta posible estimar otras situaciones físicas de interés, como lo es el caso de una suspensión formada por un nemático y una tinta, bajo un gradiente de concentración. En este sentido se han encontrado efectos notables en el espectro de dispersión para las variables transversales [134]. Otra aplicación de interés consiste en el estudio de una mezcla binaria de nemáticos, dado el gran interés que despiertan por su alto potencial tanto desde el punto de vista teórico como tecnológico. El análisis de su espectro de dispersión de luz resultaría novedoso y bien podría contribuir a su entendimiento.

Por último, es importante resaltar que los análisis efectuados para las situaciones fuera de equilibrio sólo son válidos dentro de la aproximación lineal, es decir, en donde el sistema se aleja ligeramente de su estado de equilibrio termodinámico. Sólo en este tipo de casos resulta válida la teoría de procesos estocásticos de Fox-Uhlenbeck, así como la termodinámica irreversible empleada.

Apéndice A

Relaciones de fluctuación-disipación generalizadas para una capa nemática en un sistema de Rayleigh-Bénard

Las componentes ζ_m (con $m = 1 \dots 7$) de los ruidos (4.97) y (4.98) están definidos como

$$\zeta_1(\vec{k}, t) \equiv -i \left(\frac{\gamma - 1}{\rho_0 T_0 c_p} \right)^{1/2} k_j \tilde{\pi}_j, \quad (\text{A.1})$$

$$\zeta_2(\vec{k}, t) \equiv -\frac{k_j}{\rho_0^{1/2} k} \left(k_x \tilde{\Sigma}_{xj} + k_y \tilde{\Sigma}_{yj} + k_z \tilde{\Sigma}_{zj} \right), \quad (\text{A.2})$$

$$\zeta_3(\vec{k}, t) \equiv -i \left(\frac{1}{\rho_0 T_0 c_p} \right)^{1/2} k_j \tilde{\pi}_j, \quad (\text{A.3})$$

$$\zeta_4(\vec{k}, t) \equiv -\frac{ik_z}{\rho_0^{1/2}} \frac{k_j}{k^2} \left(k_x \tilde{\Sigma}_{xj} + k_y \tilde{\Sigma}_{yj} + k_z \tilde{\Sigma}_{zj} \right) + \frac{ik_j}{\rho_0^{1/2}} \tilde{\Sigma}_{zj}, \quad (\text{A.4})$$

$$\zeta_5(\vec{k}, t) \equiv i\rho_0^{1/2} c_s \frac{k_x}{k} \tilde{\Upsilon}_x + i\rho_0^{1/2} c_s \frac{k_y}{k} \tilde{\Upsilon}_y, \quad (\text{A.5})$$

$$\zeta_6(\vec{k}, t) \equiv -\frac{k_j}{\rho_0^{1/2} k} \left(k_x \tilde{\Sigma}_{yj} - k_y \tilde{\Sigma}_{xj} \right), \quad (\text{A.6})$$

$$\zeta_7(\vec{k}, t) \equiv i\rho_0^{1/2} c_s \frac{k_x}{k} \tilde{\Upsilon}_y - i\rho_0^{1/2} c_s \frac{k_y}{k} \tilde{\Upsilon}_x, \quad (\text{A.7})$$

siendo $j = x, y, z$, y en donde $\tilde{\pi}_j$, $\tilde{\Sigma}_{ij}$ y $\tilde{\Upsilon}_j$ son, respectivamente, las transformadas espaciales de Fourier de los ruidos $\pi_i(\vec{r}, t)$, $\Sigma_{ij}(\vec{r}, t)$ y $\Upsilon_i(\vec{r}, t)$. Recordemos que, como se supuso en el Capítulo 4, estos ruidos, para el estado estacionario de no equilibrio determinado por un gradiente de temperatura uniforme y un campo gravitatorio constante, son de promedio cero y que en dicho estado estacionario de no equilibrio satisfacen las mismas relaciones de fluctuación-disipación que en el estado de equilibrio termodinámico, las cuales están dadas por las expresiones (4.31) a (4.33).

Las autocorrelaciones y correlaciones cruzadas de los ruidos en los dos puntos diferentes (\vec{k}, ω) y (\vec{q}, w) , son calculadas empleando las relaciones de fluctuación-disipación, ecuaciones (4.31)-(4.33), promediadas sobre el estado estacionario. Estas funciones están dadas por

$$\begin{aligned} \langle \zeta_1(\vec{k}, \omega) \zeta_1^*(\vec{q}, w) \rangle^{st} &= \frac{2k_B \tilde{T}^{st}(\vec{k}, \vec{q}, \vec{s}) (\gamma - 1)}{\rho_0 c_p} [\kappa_{\perp} (k_x q_x + k_y q_y) \\ &\quad + \kappa_{\parallel} k_z q_z] \delta(\omega - w), \end{aligned} \quad (\text{A.8})$$

$$\begin{aligned} \langle \zeta_2(\vec{k}, \omega) \zeta_2^*(\vec{q}, w) \rangle^{st} &= \frac{2k_B \tilde{T}^{st}(\vec{k}, \vec{q}, \vec{s})}{\rho_0 k q} [(\nu_2 + \nu_4) (k_x^2 q_x^2 + k_y^2 q_y^2) \\ &\quad + (\nu_4 - \nu_2) (k_y^2 q_x^2 + k_x^2 q_y^2) + 4\nu_2 k_x k_y q_y q_x + 4\nu_3 (k_x q_x + k_y q_y) k_z q_z \\ &\quad + \nu_5 (q_x^2 + q_y^2) k_z^2 + \nu_5 (k_x^2 + k_y^2) q_z^2 \\ &\quad + (2\nu_1 + \nu_2 - \nu_4 + 2\nu_5) k_z^2 q_z^2] \delta(\omega - w), \end{aligned} \quad (\text{A.9})$$

$$\begin{aligned} \langle \zeta_3(\vec{k}, \omega) \zeta_3^*(\vec{q}, w) \rangle^{st} &= \frac{2k_B \tilde{T}^{st}(\vec{k}, \vec{q}, \vec{s})}{\rho_0 c_p} [\kappa_{\perp} (k_x q_x + k_y q_y) \\ &\quad + \kappa_{\parallel} k_z q_z] \delta(\omega - w), \end{aligned} \quad (\text{A.10})$$

$$\begin{aligned} \langle \zeta_4(\vec{k}, \omega) \zeta_4^*(\vec{q}, w) \rangle^{st} &= \frac{2k_B \tilde{T}^{st}(\vec{k}, \vec{q}, \vec{s}) k_z q_z}{\rho_0 k^2 q^2} [(\nu_2 + \nu_4) (k_x^2 q_x^2 + k_y^2 q_y^2) \\ &\quad + (\nu_4 - \nu_2) (k_y^2 q_x^2 + k_x^2 q_y^2) + 4\nu_2 k_x k_y q_y q_x + 4\nu_3 (k_x q_x + k_y q_y) k_z q_z \\ &\quad + \nu_5 (q_x^2 + q_y^2) k_z^2 + \nu_5 (k_x^2 + k_y^2) q_z^2 \\ &\quad + (2\nu_1 + \nu_2 - \nu_4 + 2\nu_5) k_z^2 q_z^2] \delta(\omega - w), \end{aligned} \quad (\text{A.11})$$

$$\langle \zeta_5(\vec{k}, \omega) \zeta_5^*(\vec{q}, w) \rangle^{st} = \frac{2k_B \tilde{T}^{st}(\vec{k}, \vec{q}, \vec{s}) \rho_0 c_s^2}{\gamma_1 k q} (k_x q_x + k_y q_y) \delta(\omega - w), \quad (\text{A.12})$$

$$\begin{aligned} \langle \zeta_6(\vec{k}, \omega) \zeta_6^*(\vec{q}, w) \rangle^{st} &= \frac{2k_B \tilde{T}^{st}(\vec{k}, \vec{q}, \vec{s})}{\rho_0 k q} \left[\nu_2 (k_x q_x + k_y q_y)^2 \right. \\ &\quad \left. - \nu_2 (k_y q_x - k_x q_y)^2 + \nu_3 (k_x q_x + k_y q_y) k_z q_z \right] \delta(\omega - w), \end{aligned} \quad (\text{A.13})$$

$$\langle \zeta_7(\vec{k}, \omega) \zeta_7^*(\vec{q}, w) \rangle^{st} = \frac{2k_B \tilde{T}^{st}(\vec{k}, \vec{q}, \vec{s}) \rho_0 c_s^2}{\gamma_1 k q} (k_x q_x + k_y q_y) \delta(\omega - w); \quad (\text{A.14})$$

y por

$$\begin{aligned} \left\langle \zeta_1(\vec{k}, \omega) \zeta_3^*(\vec{q}, w) \right\rangle^{st} &= \frac{2k_B \tilde{T}^{st}(\vec{k}, \vec{q}, \vec{s}) (\gamma - 1)^{1/2}}{\rho_0 c_p} \\ & \quad [\kappa_{\perp} (k_x q_x + k_y q_y) + \kappa_{\parallel} k_z q_z] \delta(\omega - w), \end{aligned} \quad (\text{A.15})$$

$$\begin{aligned} \left\langle \zeta_3(\vec{k}, \omega) \zeta_1^*(\vec{q}, w) \right\rangle^{st} &= \frac{2k_B \tilde{T}^{st}(\vec{k}, \vec{q}, \vec{s}) (\gamma - 1)^{1/2}}{\rho_0 c_p} \\ & \quad [\kappa_{\perp} (k_x q_x + k_y q_y) + \kappa_{\parallel} k_z q_z] \delta(\omega - w), \end{aligned} \quad (\text{A.16})$$

$$\begin{aligned} \left\langle \zeta_2(\vec{k}, \omega) \zeta_4^*(\vec{q}, w) \right\rangle^{st} &= -\frac{2ik_B \tilde{T}^{st}(\vec{k}, \vec{q}, \vec{s}) q_z}{\rho_0 k q^2} [(\nu_2 + \nu_4) (k_x^2 q_x^2 + k_y^2 q_y^2) \\ & \quad + (\nu_4 - \nu_2) (k_y^2 q_x^2 + k_x^2 q_y^2) + 4\nu_2 k_x k_y q_y q_x + 4\nu_3 (k_x q_x + k_y q_y) k_z q_z \\ & \quad + \nu_5 (q_x^2 + q_y^2) k_z^2 + \nu_5 (k_x^2 + k_y^2) q_z^2 \\ & \quad + (2\nu_1 + \nu_2 - \nu_4 + 2\nu_5) k_z^2 q_z^2] \delta(\omega - w), \end{aligned} \quad (\text{A.17})$$

$$\begin{aligned} \left\langle \zeta_4(\vec{k}, \omega) \zeta_2^*(\vec{q}, w) \right\rangle^{st} &= \frac{2ik_B \tilde{T}^{st}(\vec{k}, \vec{q}, \vec{s}) k_z}{\rho_0 k^2 q} [(\nu_2 + \nu_4) (k_x^2 q_x^2 + k_y^2 q_y^2) \\ & \quad + (\nu_4 - \nu_2) (k_y^2 q_x^2 + k_x^2 q_y^2) + 4\nu_2 k_x k_y q_y q_x + 4\nu_3 (k_x q_x + k_y q_y) k_z q_z \\ & \quad + \nu_5 (q_x^2 + q_y^2) k_z^2 + \nu_5 (k_x^2 + k_y^2) q_z^2 \\ & \quad + (2\nu_1 + \nu_2 - \nu_4 + 2\nu_5) k_z^2 q_z^2] \delta(\omega - w). \end{aligned} \quad (\text{A.18})$$

En las ecuaciones (A.8)-(A.18), $\tilde{T}^{st}(\vec{k}, \vec{q}, \vec{s})$ puede identificarse como la transformada de Fourier espacial (4.63) de (4.2),

$$\begin{aligned} \tilde{T}^{st}(\vec{k}, \vec{q}, \vec{s}) &\equiv T_0 \delta(\vec{k} - \vec{q}) \\ & \quad - \frac{\alpha}{2is} \left[\delta(\vec{k} - \vec{q} - \vec{s}) - \delta(\vec{k} - \vec{q} + \vec{s}) \right]. \end{aligned} \quad (\text{A.19})$$

Para los fluidos simples es bien sabido que las contribuciones del no equilibrio que surgen del ruido correlacionado inhomogéneo, son en la práctica insignificanemente pequeñas comparadas con las contribuciones de no equilibrio que surgen del acoplamiento de los campos [64]. Con base en este hecho, suponemos que para un cristal líquido nemático también ocurre esto, de modo que aplicaremos la ecuación (A.19) a las funciones de autocorrelación (A.10) a (A.12) despreciando el término α . Desde luego, en casos donde no hay acoplamiento entre los campos, no pueden despreciarse los efectos de no equilibrio que surgen del ruido correlacionado inhomogéneo. Si suponemos que los efectos de no equilibrio son debidos al acoplamiento entre los modos y que no surgen de ruido correlacionado inhomogéneo, entonces en la ecuación (A.19) puede despreciarse el gradiente de temperatura α .

Cabe señalar que, sólo son relevantes las funciones de autocorrelación y de correlación cruzada de la transformada espacial y temporal de Fourier de las fluctuaciones z_3 y z_5 . En el Apéndice C, estas cantidades se escriben en términos de sus correspondientes fluctuaciones δs y δf_1 .

Apéndice B

Separación de los conjuntos de variables \vec{Z}_X^L y \vec{Z}_Y^L , y cálculo de las raíces de $p_{YY}^L(\lambda)$

En este apéndice se mostrará que los conjuntos de variables longitudinales de la misma dimensión \vec{Z}_X^L y \vec{Z}_Y^L pueden separarse en dos conjuntos independientes entre sí. Además, hallaremos las tres raíces del polinomio característico $p_{YY}^L(\lambda)$ de tercer orden en λ . La realización de lo anterior resulta fundamental para obtener los resultados señalados en el Capítulo 4.

B.1. Separación de \vec{Z}_X^L y \vec{Z}_Y^L en conjuntos independientes

Si se escribe al conjunto de variables longitudinales de la misma dimensión (4.91) como $\vec{Z}^L = (\vec{Z}_X^L, \vec{Z}_Y^L)^\dagger$, en donde $\vec{Z}_X^L = (z_1, z_2)^\dagger$ y $\vec{Z}_Y^L = (z_3, z_4, z_5)^\dagger$, esta separación permite reescribir al conjunto de ecuaciones (4.99) en la forma

$$\frac{\partial}{\partial t} \vec{Z}^L(\vec{k}, t) = -N^L \vec{Z}^L(\vec{k}, t) + \vec{\Xi}^L(\vec{k}, t), \quad (\text{B.1})$$

en donde

$$N^L = \left(\begin{array}{c|c} N_{XX}^L & N_{XY}^L \\ \hline N_{YX}^L & N_{YY}^L \end{array} \right), \quad (\text{B.2})$$

siendo

$$N_{XX}^L = \left(\begin{array}{cc} (\gamma - 1) D_T k^2 & c_s k + \frac{g}{c_s} \frac{ik_z}{k} \\ -c_s k + \frac{g}{c_s} \frac{ik_z}{k} & \sigma_1 k^2 \end{array} \right), \quad (\text{B.3})$$

$$N_{XY}^L = \left(\begin{array}{ccc} (\gamma - 1)^{1/2} D_T k^2 & -\frac{g}{c_s} & \alpha \beta \chi_a k \\ -(\gamma - 1)^{1/2} \frac{g}{c_s} \frac{ik_z}{k} & \sigma_2 ik k_z & -\frac{\lambda K_L}{\rho_0 c_s} ik^2 k_z \end{array} \right), \quad (\text{B.4})$$

$$N_{YX}^L = \begin{pmatrix} (\gamma - 1)^{1/2} D_T k^2 & -\frac{\beta X c_s}{(\gamma - 1)^{1/2}} \frac{i k_z}{k} \\ \frac{g}{c_s} \frac{k^2}{k^2} & -\sigma_2 \frac{i k^2 k_z}{k} \\ 0 & -\lambda c_s \frac{i k^2 k_z}{k^2} \end{pmatrix} \quad (\text{B.5})$$

y

$$N_{YX}^L = \begin{pmatrix} D_T k^2 & \frac{\beta X c_s}{(\gamma - 1)^{1/2}} & \frac{\alpha \beta \chi_a}{(\gamma - 1)^{1/2}} k \\ -(\gamma - 1)^{1/2} \frac{g}{c_s} \frac{k^2}{k^2} & \sigma_3 k^2 & -\frac{\Omega K_I}{\rho_0 c_s} k^3 \\ 0 & \Omega c_s k & \frac{K_I}{\gamma_1} k^2 \end{pmatrix}. \quad (\text{B.6})$$

Además, en (B.1) también se ha escrito al vector longitudinal de términos estocásticos (4.97) como $\vec{\Xi}^L(\vec{k}, t) = (\vec{\Xi}_X^L, \vec{\Xi}_Y^L)^\dagger$, en donde $\vec{\Xi}_X^L(\vec{k}, t) = (\zeta_1, \zeta_2)^\dagger$ y $\vec{\Xi}_Y^L(\vec{k}, t) = (\zeta_3, \zeta_4, \zeta_5)^\dagger$.

Seguindo el método propuesto en la referencia [32] para un fluido simple, puede mostrarse que el sistema (B.1) posee la propiedad de que, en una muy buena aproximación, las variables $\delta \vec{Z}_X^L$ y $\delta \vec{Z}_Y^L$ son mutuamente independientes. Para ello, reescribamos a dicho sistema como

$$\frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} \vec{Z}_X^L \\ \vec{Z}_Y^L \end{pmatrix} = - \left(\begin{array}{c|c} N_{XX}^L & N_{XY}^L \\ \hline N_{YX}^L & N_{YY}^L \end{array} \right) \begin{pmatrix} \vec{Z}_X^L \\ \vec{Z}_Y^L \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \vec{\Xi}_X^L(\vec{k}, t) \\ \vec{\Xi}_Y^L(\vec{k}, t) \end{pmatrix}, \quad (\text{B.7})$$

y definamos los parámetros pequeños adimensionales

$$\epsilon_1 \equiv \frac{k \hat{\Gamma}'}{c_s}, \quad \text{con } \hat{\Gamma}' = \{D_T, \sigma_1, \sigma_2, \sigma_3\}; \quad (\text{B.8})$$

$$\epsilon_2 \equiv \frac{k \hat{\Gamma}''}{c_s}, \quad \text{con } \hat{\Gamma}'' = \left\{ \frac{\beta X c_s}{(\gamma - 1)^{1/2} k^2}, \frac{\alpha \beta \chi_a}{k} \right\}; \quad (\text{B.9})$$

$$\epsilon_3 \equiv \frac{g}{c_s^2 k}; \quad (\text{B.10})$$

$$\epsilon_4 \equiv \frac{k \hat{\Gamma}'''}{c_s}, \quad \text{con } \hat{\Gamma}''' \equiv \left\{ \frac{\lambda K_I k}{\rho_0 c_s}, \frac{\Omega K_I k}{\rho_0 c_s}, \frac{K_I}{\gamma_1} \right\}. \quad (\text{B.11})$$

Puede verificarse fácilmente, empleando valores típicos de los parámetros materiales de un nemático y las cantidades utilizadas en experimentos de dispersión de luz, que $\epsilon_1 \sim (10^{-3} - 10^{-2})$, $\epsilon_2 \sim (10^{-9} - 10^{-7})$, $\epsilon_3 \sim 10^{-12}$ y $\epsilon_4 \sim (10^{-6} - 10^{-5})$.

Con el propósito de realizar el cálculo siguiente, cualquiera de las cantidades indicadas en (B.8) entre las llaves se denotarán como $\hat{\Gamma}'$; de forma similar, en (B.9) y (B.10) son señaladas las cantidades que se identificarán, respectivamente, como $\hat{\Gamma}''$ y $\hat{\Gamma}'''$. Por consiguiente, al tomar en cuenta las definiciones anteriores, la matriz (B.3) puede reescribirse como

$$N_{XX}^L = \epsilon_1 c_s k \begin{pmatrix} (\gamma - 1) & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} + c_s k \begin{pmatrix} 0 & 1 + i \epsilon_3 \frac{k_z}{k} \\ -1 + i \epsilon_3 \frac{k_z}{k} & 0 \end{pmatrix}; \quad (\text{B.12})$$

para la matriz (B.4) se tiene

$$N_{XY}^L = c_s k \begin{pmatrix} (\gamma - 1)^{1/2} \epsilon_1 & -\epsilon_3 & \epsilon_2 \\ -i (\gamma - 1)^{1/2} \epsilon_3 \frac{k_z}{k} & i \epsilon_1 \frac{k_z}{k} & -i \epsilon_4 \frac{k_z}{k} \end{pmatrix}; \quad (\text{B.13})$$

en tanto que la matriz (B.5) puede reescribirse como

$$N_{YX}^L = c_s k \begin{pmatrix} (\gamma - 1)^{1/2} \epsilon_1 & -i\epsilon_2 \frac{k_z}{k} \\ \epsilon_3 \frac{k^2}{k^2} & -i\epsilon_1 \frac{k^2 k_z}{k^3} \\ 0 & -i\lambda \frac{k^2 k_z}{k^3} \end{pmatrix}; \quad (\text{B.14})$$

y por último, para la matriz (B.6) tenemos

$$N_{YY}^L = c_s k \begin{pmatrix} \epsilon_1 & \epsilon_2 & \frac{1}{(\gamma-1)^{1/2}} \epsilon_2 \\ -(\gamma-1)^{1/2} \epsilon_3 \frac{k^2}{k^2} & \epsilon_1 & -\epsilon_4 \\ 0 & \Omega & \epsilon_4 \end{pmatrix}; \quad (\text{B.15})$$

Resumiendo, hemos encontrado que $N_{XY}^L = N_{XX}^L = N_{YY}^L = O(\epsilon_i c_s k)$ y $N_{XX}^L = O(c_s k) + O(\epsilon_i c_s k)$ (con $i = 1, \dots, 4$), para parámetros $\epsilon_i \ll 1$.

Al calcular la transformada de Fourier, con respecto a t , del sistema (B.7), obtenemos

$$\begin{aligned} i\omega \vec{Z}_X^L &= -N_{XX}^L \vec{Z}_X^L - N_{XY}^L \vec{Z}_Y^L + \vec{\Xi}_X^L(\vec{k}, t), \\ i\omega \vec{Z}_Y^L &= -N_{YX}^L \vec{Z}_X^L - N_{YY}^L \vec{Z}_Y^L + \vec{\Xi}_Y^L(\vec{k}, t). \end{aligned} \quad (\text{B.16})$$

Para el pico de Rayleigh, $\omega \sim D_T k^2 = \epsilon_1 c_s k$, es decir, $\omega = O(\epsilon_i c_s k)$. De esta manera, de la primera ecuación (B.16), tenemos

$$i\omega \vec{Z}_X^L = -N_{XX}^L \vec{Z}_X^L - N_{XY}^L \vec{Z}_Y^L + \vec{\Xi}_X^L(\vec{k}, t). \quad (\text{B.17})$$

Considerando que N_{XX}^L es la matriz dominante en la ecuación (B.17), de ésta se llega a

$$\vec{Z}_X^L = (N_{XX}^L)^{-1} \vec{\Xi}_X^L(\vec{k}, t), \quad (\text{B.18})$$

en donde $(N_{XX}^L)^{-1}$ es la matriz inversa de N_{XX}^L . La sustitución de (B.18) en la segunda ecuación (B.16) da como resultado

$$i\omega \vec{Z}_Y^L = -N_{YX}^L (N_{XX}^L)^{-1} \vec{\Xi}_X^L(\vec{k}, t) - N_{YY}^L \vec{Z}_Y^L + \vec{\Xi}_Y^L(\vec{k}, t). \quad (\text{B.19})$$

Dado que

$$(N_{XX}^L)^{-1} = \frac{1}{c_s k} \begin{pmatrix} \frac{\epsilon_1}{1 + \epsilon_3^2 \frac{k^2}{k^2} + (\gamma-1)\epsilon_1^2} & -\frac{1 + i\epsilon_3 \frac{k_z}{k}}{1 + \epsilon_3^2 \frac{k^2}{k^2} + (\gamma-1)\epsilon_1^2} \\ \frac{1 + \epsilon_3^2 \frac{k^2}{k^2}}{1 + i\epsilon_3 \frac{k_z}{k} + (\gamma-1)\epsilon_1^2 + \epsilon_3^2 \frac{k^2}{k^2} + i(\gamma-1)\epsilon_1^2 \epsilon_3 \frac{k_z}{k} + i\epsilon_3^3 \frac{k^3}{k^3}} & \frac{(\gamma-1)\epsilon_1 + i(\gamma-1)\epsilon_1 \epsilon_3 \frac{k_z}{k}}{1 + i\epsilon_3 \frac{k_z}{k} + (\gamma-1)\epsilon_1^2 + \epsilon_3^2 \frac{k^2}{k^2} + i(\gamma-1)\epsilon_1^2 \epsilon_3 \frac{k_z}{k} + i\epsilon_3^3 \frac{k^3}{k^3}} \end{pmatrix}, \quad (\text{B.20})$$

entonces

$$N_{YX}^L (N_{XX}^L)^{-1} = \begin{pmatrix} N_{11} & N_{12} \\ N_{21} & N_{22} \\ N_{31} & N_{32} \end{pmatrix}, \quad (\text{B.21})$$

en donde

$$N_{11} = \frac{(\gamma - 1)^{1/2} \epsilon_1^2}{1 + (\gamma - 1) \epsilon_1^2 + \epsilon_3^2 \frac{k_z^2}{k^2}} - \frac{i \epsilon_2 \frac{k_z}{k} \left(1 + \epsilon_3^2 \frac{k^2}{k^2}\right)}{1 + i \epsilon_3 \frac{k_z}{k} + (\gamma - 1) \epsilon_1^2 + \epsilon_3^2 \frac{k_z^2}{k^2} + i (\gamma - 1) \epsilon_1^2 \epsilon_3 \frac{k_z}{k} + i \epsilon_3^3 \frac{k_z^3}{k^3}}, \quad (\text{B.22})$$

$$N_{12} = -\frac{(\gamma - 1)^{1/2} \epsilon_1 \left(1 + i \epsilon_3 \frac{k_z}{k}\right)}{1 + (\gamma - 1) \epsilon_1^2 + \epsilon_3^2 \frac{k_z^2}{k^2}} - \frac{i (\gamma - 1) \epsilon_1 \epsilon_2 \frac{k_z}{k} \left(1 + i \epsilon_3 \frac{k_z}{k}\right)}{1 + i \epsilon_3 \frac{k_z}{k} + (\gamma - 1) \epsilon_1^2 + \frac{k_z^2}{k^2} \epsilon_3^2 + i (\gamma - 1) \epsilon_1^2 \epsilon_3 \frac{k_z}{k} + i \epsilon_3^3 \frac{k_z^3}{k^3}},$$

$$N_{21} = \frac{\epsilon_1 \epsilon_3 \frac{k_z^2}{k^2}}{1 + (\gamma - 1) \epsilon_1^2 + \epsilon_3^2 \frac{k_z^2}{k^2}} - \frac{i \epsilon_1 \frac{k_z k_1^2}{k^3} \left(1 + \epsilon_3^2 \frac{k^2}{k^2}\right)}{1 + i \epsilon_3 \frac{k_z}{k} + (\gamma - 1) \epsilon_1^2 + \epsilon_3^2 \frac{k_z^2}{k^2} + i (\gamma - 1) \epsilon_1^2 \epsilon_3 \frac{k_z}{k} + i \epsilon_3^3 \frac{k_z^3}{k^3}}, \quad (\text{B.23})$$

$$N_{22} = -\frac{\epsilon_3 \frac{k_1^2}{k^2} \left(1 + i \epsilon_3 \frac{k_z}{k}\right)}{1 + (\gamma - 1) \epsilon_1^2 + \epsilon_3^2 \frac{k_z^2}{k^2}} - \frac{i (\gamma - 1) \epsilon_1^2 \frac{k_z k_1^2}{k^3} \left(1 + i \epsilon_3 \frac{k_z}{k}\right)}{1 + i \epsilon_3 \frac{k_z}{k} + (\gamma - 1) \epsilon_1^2 + \epsilon_3^2 \frac{k_z^2}{k^2} + i (\gamma - 1) \epsilon_1^2 \epsilon_3 \frac{k_z}{k} + i \epsilon_3^3 \frac{k_z^3}{k^3}}, \quad (\text{B.24})$$

$$N_{31} = -\frac{i \lambda \frac{k_z k_1^2}{k^3} \left(1 + \epsilon_3^2 \frac{k^2}{k^2}\right)}{1 + i \epsilon_3 \frac{k_z}{k} + (\gamma - 1) \epsilon_1^2 + \epsilon_3^2 \frac{k_z^2}{k^2} + i (\gamma - 1) \epsilon_1^2 \epsilon_3 \frac{k_z}{k} + i \epsilon_3^3 \frac{k_z^3}{k^3}}, \quad (\text{B.25})$$

$$N_{32} = -\frac{i (\gamma - 1) \lambda \epsilon_1 \frac{k_z k_1^2}{k^3} \left(1 - \epsilon_3 \frac{k_z}{k}\right)}{1 + i \epsilon_3 \frac{k_z}{k} + (\gamma - 1) \epsilon_1^2 + \epsilon_3^2 \frac{k_z^2}{k^2} + i (\gamma - 1) \epsilon_1^2 \epsilon_3 \frac{k_z}{k} + i \epsilon_3^3 \frac{k_z^3}{k^3}}. \quad (\text{B.26})$$

En las relaciones (B.22) a (B.26) todos los numeradores dependen de los parámetros adimensionales ϵ_i (con $i = 1, \dots, 4$), excepto la N_{31} determinada por (B.25), que en ausencia de ϵ_3 depende de λ . Dado que $\lambda \sim 1$, aun así, N_{31} es una cantidad pequeña debido a que en experimentos típicos de dispersión de luz $k_z k_1^2 k^{-3} \ll 1$. De esta manera, como $N_{YX}^L (N_{XX}^L)^{-1} = O(\epsilon_i)$, en la ecuación (B.19) el término $N_{YX}^L (N_{XX}^L)^{-1} \vec{\Xi}_X^L(\vec{k}, t)$ puede ignorarse al compararse con $\vec{\Xi}_Y^L(\vec{k}, t)$. Por consiguiente, para los términos dominantes, puede simplificarse (B.19) y el pico de Rayleigh puede calcularse solamente por

$$i\omega \vec{Z}_Y^L = -N_{YY}^L \vec{Z}_Y^L + \vec{\Xi}_Y^L(\vec{k}, t), \quad (\text{B.27})$$

lo cual implica que, dentro de esta aproximación, el conjunto de variables \vec{Z}_Y^L está desacoplado del \vec{Z}_X^L . Dicho de otro modo, el pico de Rayleigh está determinado por el conjunto de variables $\vec{Z}_Y^L = (z_3, z_4, z_5)^\dagger$, es decir, por el acoplamiento de z_3 (entropía) con z_4 (componente transversal del flujo) y z_5 (componente transversal del director). Más aún, estas afirmaciones implican que, en la matriz N^L dada por (B.2), los bloques N_{XY}^L y N_{YX}^L pueden despreciarse, de modo que puede simplificarse como

$$N^L = \left(\begin{array}{c|c} N_{XX}^L & 0 \\ \hline 0 & N_{YY}^L \end{array} \right). \quad (\text{B.28})$$

Consecuentemente, el conjunto de ecuaciones (B.7) se reduce a los sistemas desacoplados

$$\frac{\partial}{\partial t} \vec{Z}_X^L(\vec{k}, t) = -N_{XX}^L \vec{Z}_X^L(\vec{k}, t) + \vec{\Xi}_X^L(\vec{k}, t), \quad (\text{B.29})$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \vec{Z}_Y^L(\vec{k}, t) = -N_{YY}^L \vec{Z}_Y^L(\vec{k}, t) + \vec{\Xi}_Y^L(\vec{k}, t). \quad (\text{B.30})$$

Es importante señalar que la aproximación realizada nos permite escribir al polinomio característico de las variables longitudinales indicado en (4.101) como $p^L(\lambda) = p_{XX}^L(\lambda) p_{YY}^L(\lambda)$.

B.2. Aproximación de las raíces del polinomio característico $p_{YY}^L(\lambda)$

En el apartado 4.3.1.2 se mencionó que, en términos de la variable $\bar{s} \equiv \lambda/\bar{\omega}$ y las cantidades pequeñas (4.109), la ecuación característica cúbica $p_{YY}^L(\lambda) = 0$ puede escribirse como

$$p_{YY}^L(\bar{s}) = \bar{s}^3 + A_1\bar{s}^2 + A_2\bar{s} + A_3 = 0, \quad (\text{B.31})$$

en la cual

$$A_1 \equiv -a_1 - a_3 - a_5, \quad (\text{B.32})$$

$$A_2 \equiv a_1a_3 + a_1a_5 + a_3a_5 + a_6 + a'_0, \quad (\text{B.33})$$

$$A_3 \equiv -a_1a_3a_5 - a_1a_6 - a'_0a_5 + a_0a'_1. \quad (\text{B.34})$$

son coeficientes reales. Se indicó también que sus raíces están dadas por las expresiones (4.121) a (4.127). De manera completamente equivalente, estas raíces pueden escribirse en la forma

$$\bar{s}_3 = -\frac{A_1}{3} - \frac{1}{2}(S_1 + S_2) + \frac{\sqrt{3}i}{2}(S_1 - S_2), \quad (\text{B.35})$$

$$\bar{s}_4 = -\frac{A_1}{3} - \frac{1}{2}(S_1 + S_2) - \frac{\sqrt{3}i}{2}(S_1 - S_2), \quad (\text{B.36})$$

$$\bar{s}_5 = -\frac{A_1}{3} + (S_1 + S_2), \quad (\text{B.37})$$

en donde S_1 y S_2 están dadas por

$$S_1 \equiv (\bar{R} + \sqrt{\Delta})^{1/3} \quad \text{y} \quad S_2 \equiv (\bar{R} - \sqrt{\Delta})^{1/3}, \quad (\text{B.38})$$

siendo el discriminante

$$\Delta \equiv Q^3 + \bar{R}^2. \quad (\text{B.39})$$

con

$$Q \equiv \frac{3A_2 - A_1^2}{9} \quad \text{y} \quad \bar{R} \equiv \frac{-2A_1^3 + 9A_2A_1 - 27A_3}{54}. \quad (\text{B.40})$$

A las tres expresiones (B.35) a (B.37), que permiten hallar las raíces exactas del polinomio cúbico general (B.31), comúnmente se les denomina como fórmula de Cardano. La naturaleza de estas raíces queda completamente determinada por el discriminante (B.39), que dependiendo del signo de éste, corresponde a alguno de los siguientes tres casos:

- i)* Si $\Delta > 0$, una de las raíces es real y las dos son complejas conjugadas.
- ii)* Si $\Delta = 0$, todas las raíces son reales y al menos dos de ellas son idénticas.
- iii)* Si $\Delta < 0$, todas las raíces son reales y distintas.

Caso particular Cuando $A_3 = 0$, el polinomio cúbico (B.31) se reduce a

$$p_{YY}^L(\bar{s}) = (\bar{s}^2 + A_1\bar{s} + A_2)\bar{s} = 0, \quad (\text{B.41})$$

en donde uno de los factores es una ecuación polinomial cuadrática. Del primer factor de (B.41), dado por la cuadrática, se hallan las raíces $\bar{s}_3 = -\frac{1}{2}A_1 - \frac{1}{2}\sqrt{\Delta'}$ y $\bar{s}_4 = -\frac{1}{2}A_1 + \frac{1}{2}\sqrt{\Delta'}$, en donde $\Delta' \equiv A_1^2 - 4A_2$ es ahora el discriminante; en tanto que del segundo, se obtiene la raíz $\bar{s}_5 = 0$. Estas raíces quedan completamente caracterizadas por el signo de Δ' : serán reales y distintas si $\Delta' > 0$, reales e idénticas si $\Delta' = 0$ y complejas conjugadas si $\Delta' < 0$. Puede mostrarse fácilmente que si

$$S_1 = \frac{A_1}{6} - \frac{i\sqrt{\Delta'}}{2\sqrt{3}} \quad \text{y} \quad S_2 = \frac{A_1}{6} + \frac{i\sqrt{\Delta'}}{2\sqrt{3}}, \quad (\text{B.42})$$

entonces las tres raíces cúbicas (B.35) a (B.37) simplifican, respectivamente, en las \bar{s}_3 , \bar{s}_4 y \bar{s}_5 señaladas con anterioridad. Este caso particular resulta de interés debido a que, como se muestra al final de este apéndice, corresponde al del límite de un fluido simple en un estado estacionario de no equilibrio como el aquí considerado.

B.2.1. Aproximación de las raíces del polinomio $p_{YY}^L(\lambda)$

Para encontrar la forma explícita de las raíces (B.37) a (B.36) en términos de los coeficientes A_1 , A_2 y A_3 de (B.31), se requiere encontrar a S_1 y S_2 en términos de éstos. En efecto, al sustituir (B.39) y (B.40) en (B.38), S_1 y S_2 pueden expresarse como

$$S_{1,2} = \left(\frac{-2A_1^3 + 9A_2A_1 - 27A_3}{54} \pm \sqrt{\frac{1}{27}A_1^3A_3 - \frac{1}{108}A_1^2A_2^2 - \frac{1}{6}A_1A_2A_3 + \frac{1}{27}A_2^3 + \frac{1}{4}A_3^2} \right)^{1/3}. \quad (\text{B.43})$$

De acuerdo con los valores de los parámetros materiales de la mayoría de los nemáticos a temperatura ambiente y para las magnitudes típicas de las de las variables involucradas en experimentos de dispersión de luz, tal como se discutió enseguida de definir las cantidades pequeñas o reducidas (4.109), el orden de magnitud de éstas es $a_0 \sim 10^{-21}$, $a'_0 \sim 10^{-21}$, $a_1 \sim 10^{-3}$, $a'_1 \sim 10^{-3}$, $a_3 \sim 10^{-2}$, $a_5 \sim 10^{-5}$ y $a_6 \sim 10^{-6}$. Más aún, dado que $\bar{\omega} \sim 10^{10}$, el orden de magnitud de los coeficientes (B.32) a (B.34) es $A_1 \sim 10^{-2}$, $A_2 \sim 10^{-5}$ y $A_3 \sim 10^{-9}$. Por consiguiente, (B.43) puede aproximarse como

$$S_{1,2} \simeq -\frac{A_1}{3} \left(1 - \frac{3A_2}{2A_1^2} + \frac{3^2A_3}{2A_1^3} \right) \left[1 \mp \frac{i3^{3/2}A_2}{2A_1^2} \left(1 - \frac{2A_1A_3}{A_2^2} \right) \right]^{1/3}. \quad (\text{B.44})$$

En la deducción de (B.44) se ha empleado la aproximación $(1 \pm x)^{1/n} \simeq 1 \pm \frac{1}{n}x$ (para $x^2 < 1$).

El cálculo de (B.44) requiere encontrar las raíces cúbicas de los números complejos

$$(1 \pm i\varepsilon)^{1/3}, \quad (\text{B.45})$$

en donde

$$\varepsilon \equiv \frac{3^{3/2}A_2}{2A_1^2} \left(1 - \frac{2A_1A_3}{A_2^2} \right). \quad (\text{B.46})$$

Cabe señalar que $\varepsilon \sim 10^{-1}$. Las raíces buscadas son

$$\omega_k = \hat{r}^{1/3} \left[\cos \left(\frac{\hat{\theta} + 2k\pi}{3} \right) + i \operatorname{sen} \left(\frac{\hat{\theta} + 2k\pi}{3} \right) \right], \quad (\text{B.47})$$

con $k = 0, 1, 2$, siendo

$$\hat{r} = (1 + \varepsilon^2)^{1/2} \quad \text{y} \quad \hat{\theta} = \arctan \varepsilon \quad (\text{B.48})$$

su módulo y su argumento, respectivamente. Explícitamente las tres raíces de (B.45) son

i) Para $k = 0$

$$\omega_0 = \hat{r}^{1/3} \left[\cos \left(\frac{\arctan \varepsilon}{3} \right) + i \operatorname{sen} \left(\frac{\arctan \varepsilon}{3} \right) \right], \quad (\text{B.49})$$

ii) Para $k = 1$

$$\omega_1 = \hat{r}^{1/3} \left[\cos \left(\frac{\arctan \varepsilon + 2\pi}{3} \right) + i \operatorname{sen} \left(\frac{\arctan \varepsilon + 2\pi}{3} \right) \right], \quad (\text{B.50})$$

iii) Para $k = 2$

$$\omega_2 = \hat{r}^{1/3} \left[\cos \left(\frac{\arctan \varepsilon + 4\pi}{3} \right) + i \operatorname{sen} \left(\frac{\arctan \varepsilon + 4\pi}{3} \right) \right]. \quad (\text{B.51})$$

Al tomar en consideración que $\arctan x = x - \frac{1}{3}x^3 + \frac{1}{5}x^5 - \dots$, así como las identidades trigonométricas $\cos(x+y) = \cos x \cos y - \operatorname{sen} x \operatorname{sen} y$ y $\operatorname{sen}(x+y) = \operatorname{sen} x \cos y + \cos x \operatorname{sen} y$ puede mostrarse que, hasta orden uno en ε , las raíces (B.49) a (B.51) pueden simplificarse como

$$\omega_0^\pm = 1 \pm i \frac{\varepsilon}{3}, \quad (\text{B.52})$$

$$\omega_1^\pm = -\frac{1}{2} - \frac{\sqrt{3}\varepsilon}{6} \pm i \left(\frac{\sqrt{3}}{2} - \frac{\varepsilon}{6} \right), \quad (\text{B.53})$$

$$\omega_2^\pm = -\frac{1}{2} + \frac{\sqrt{3}\varepsilon}{6} \mp i \left(\frac{\sqrt{3}}{2} + \frac{\varepsilon}{6} \right). \quad (\text{B.54})$$

Cabe señalar que si en (B.52) a (B.54) hacemos $\varepsilon = 0$, se obtienen las tres raíces cúbicas de 1, a saber, $\omega_0 = 1$, $\omega_1 = -\frac{1}{2} + i \frac{\sqrt{3}}{2}$ y $\omega_2 = -\frac{1}{2} - i \frac{\sqrt{3}}{2}$.

Al considerar las raíces (B.52) a (B.54) de (B.45), se encuentra que las tres raíces del factor

$$\left[1 \pm \frac{i 3^{3/2} A_2}{2A_1^2} \left(1 - \frac{2A_1 A_3}{A_2^2} \right) \right]^{1/3} \quad (\text{B.55})$$

de (B.44), son

$$\omega_0^\pm = 1 \pm i \frac{1}{3} \frac{3^{3/2} A_2}{2A_1^2} \left(1 - \frac{2A_1 A_3}{A_2^2} \right), \quad (\text{B.56})$$

$$\omega_1^\pm = -\frac{1}{2} - \frac{\sqrt{3}}{6} \frac{3^{3/2} A_2}{2A_1^2} \left(1 - \frac{2A_1 A_3}{A_2^2} \right) \pm i \left[\frac{\sqrt{3}}{2} - \frac{1}{6} \frac{3^{3/2} A_2}{2A_1^2} \left(1 - \frac{2A_1 A_3}{A_2^2} \right) \right], \quad (\text{B.57})$$

$$\omega_2^\pm = -\frac{1}{2} + \frac{\sqrt{3}}{6} \frac{3^{3/2} A_2}{2A_1^2} \left(1 - \frac{2A_1 A_3}{A_2^2} \right) \mp i \left[\frac{\sqrt{3}}{2} + \frac{1}{6} \frac{3^{3/2} A_2}{2A_1^2} \left(1 - \frac{2A_1 A_3}{A_2^2} \right) \right]. \quad (\text{B.58})$$

Por consiguiente, partiendo de (B.44), (B.55) y las tres raíces (B.56) a (B.58), S_1 puede escribirse como

$$S_1 \simeq \begin{cases} -\frac{A_1}{3} \left(1 - \frac{3A_2A_1}{2A_1^3} + \frac{3^2A_3}{2A_1^3}\right) \left[1 - i\frac{1}{3} \frac{3^{3/2}A_2}{2A_1^2} \left(1 - \frac{2A_1A_3}{A_2^2}\right)\right], & \text{para } \omega_0^-, \\ -\frac{A_1}{3} \left(1 - \frac{3A_2A_1}{2A_1^3} + \frac{3^2A_3}{2A_1^3}\right) \left\{-\frac{1}{2} - \frac{\sqrt{3}}{6} \frac{3^{3/2}A_2}{2A_1^2} \left(1 - \frac{2A_1A_3}{A_2^2}\right)\right\}, & \text{para } \omega_1^-, \\ -i \left[\frac{\sqrt{3}}{2} - \frac{1}{6} \frac{3^{3/2}A_2}{2A_1^2} \left(1 - \frac{2A_1A_3}{A_2^2}\right)\right], & \\ -\frac{A_1}{3} \left(1 - \frac{3A_2A_1}{2A_1^3} + \frac{3^2A_3}{2A_1^3}\right) \left\{-\frac{1}{2} + \frac{\sqrt{3}}{6} \frac{3^{3/2}A_2}{2A_1^2} \left(1 - \frac{2A_1A_3}{A_2^2}\right)\right\}, & \text{para } \omega_2^-, \\ +i \left[\frac{\sqrt{3}}{2} + \frac{1}{6} \frac{3^{3/2}A_2}{2A_1^2} \left(1 - \frac{2A_1A_3}{A_2^2}\right)\right], & \end{cases} \quad (\text{B.59})$$

en tanto que S_2 toma la forma

$$S_2 \simeq \begin{cases} -\frac{A_1}{3} \left(1 - \frac{3A_2A_1}{2A_1^3} + \frac{3^2A_3}{2A_1^3}\right) \left[1 + i\frac{1}{3} \frac{3^{3/2}A_2}{2A_1^2} \left(1 - \frac{2A_1A_3}{A_2^2}\right)\right], & \text{para } \omega_0^+, \\ -\frac{A_1}{3} \left(1 - \frac{3A_2A_1}{2A_1^3} + \frac{3^2A_3}{2A_1^3}\right) \left\{-\frac{1}{2} - \frac{\sqrt{3}}{6} \frac{3^{3/2}A_2}{2A_1^2} \left(1 - \frac{2A_1A_3}{A_2^2}\right)\right\}, & \text{para } \omega_1^+, \\ +i \left[\frac{\sqrt{3}}{2} - \frac{1}{6} \frac{3^{3/2}A_2}{2A_1^2} \left(1 - \frac{2A_1A_3}{A_2^2}\right)\right], & \\ -\frac{A_1}{3} \left(1 - \frac{3A_2A_1}{2A_1^3} + \frac{3^2A_3}{2A_1^3}\right) \left\{-\frac{1}{2} + \frac{\sqrt{3}}{6} \frac{3^{3/2}A_2}{2A_1^2} \left(1 - \frac{2A_1A_3}{A_2^2}\right)\right\}, & \text{para } \omega_2^+. \\ -i \left[\frac{\sqrt{3}}{2} + \frac{1}{6} \frac{3^{3/2}A_2}{2A_1^2} \left(1 - \frac{2A_1A_3}{A_2^2}\right)\right], & \end{cases} \quad (\text{B.60})$$

Al desarrollar los productos indicados en (B.59) y (B.60), así como al considerar que $A_1 \sim 10^{-2}$, $A_2 \sim 10^{-5}$ y $A_3 \sim 10^{-9}$, se obtiene

$$S_1 + S_2 \simeq \begin{cases} -\frac{2A_1}{3} + \frac{A_2}{A_1} - \frac{3A_3}{A_1^2}, & \text{para } \omega_0^- \text{ y } \omega_0^+, \\ \frac{A_1}{3} - \frac{3A_2^2}{4A_1^3} - \frac{A_3}{A_2}, & \text{para } \omega_1^- \text{ y } \omega_1^+, \\ \frac{A_1}{3} - \frac{A_2}{A_1} + \frac{A_3}{A_2}, & \text{para } \omega_2^- \text{ y } \omega_2^+; \end{cases} \quad (\text{B.61})$$

y además

$$S_1 - S_2 \simeq \begin{cases} \sqrt{\frac{A_2^2}{A_1^2} + \frac{4A_3}{A_1} - \frac{6A_2A_3}{A_1^3}}, & \text{para } \omega_0^- \text{ y } \omega_0^+, \\ \frac{i}{\sqrt{3}} \sqrt{A_1^2 - 4A_2 - \frac{2A_1A_3}{A_2}}, & \text{para } \omega_1^- \text{ y } \omega_1^+, \\ \frac{i}{\sqrt{3}} \sqrt{A_1^2 - 2A_2 - \frac{2A_1A_3}{A_2}}, & \text{para } \omega_2^- \text{ y } \omega_2^+. \end{cases} \quad (\text{B.62})$$

Finalmente, la sustitución de los valores de la suma (B.61) y la diferencia (B.62), en las expresiones (B.37) a (B.36) permite distinguir tres grupos de raíces $\{\bar{s}_3, \bar{s}_4, \bar{s}_5\}$, uno para a cada par de valores ω_j^- y ω_j^+ (con $j = 1, 2, 3$); esto es,

i) Para ω_0^- y ω_0^+

$$\bar{s}_3 = -\frac{A_2}{2A_1} + \frac{3A_3}{2A_1^2} + \frac{\sqrt{3}i}{2} \sqrt{\frac{A_2^2}{A_1^2} + \frac{4A_3}{A_1} - \frac{6A_2A_3}{A_1^3}}, \quad (\text{B.63})$$

$$\bar{s}_4 = -\frac{A_2}{2A_1} + \frac{3A_3}{2A_1^2} - \frac{\sqrt{3}i}{2} \sqrt{\frac{A_2^2}{A_1^2} + \frac{4A_3}{A_1} - \frac{6A_2A_3}{A_1^3}}. \quad (\text{B.64})$$

$$\bar{s}_5 = -A_1 + \frac{A_2}{A_1} - \frac{3A_3}{A_1^2}, \quad (\text{B.65})$$

ii) Para ω_1^- y ω_1^+

$$\bar{s}_3 \simeq -\frac{A_1}{2} + \frac{A_3}{2A_2} - \frac{1}{2} \sqrt{A_1^2 - 4A_2 - \frac{2A_1A_3}{A_2}}, \quad (\text{B.66})$$

$$\bar{s}_4 \simeq -\frac{A_1}{2} + \frac{A_3}{2A_2} + \frac{1}{2}\sqrt{A_1^2 - 4A_2 - \frac{2A_1A_3}{A_2}}; \quad (\text{B.67})$$

$$\bar{s}_5 \simeq -\frac{A_3}{A_2}, \quad (\text{B.68})$$

iii) Para ω_2^- y ω_2^+

$$\bar{s}_3 \simeq -\frac{A_1}{2} + \frac{A_2}{2A_1} - \frac{A_3}{2A_2} - \frac{1}{2}\sqrt{A_1^2 - 2A_2 - \frac{2A_1A_3}{A_2}}, \quad (\text{B.69})$$

$$\bar{s}_4 \simeq -\frac{A_1}{2} + \frac{A_2}{2A_1} - \frac{A_3}{2A_2} + \frac{1}{2}\sqrt{A_1^2 - 2A_2 - \frac{2A_1A_3}{A_2}}. \quad (\text{B.70})$$

$$\bar{s}_5 \simeq -\frac{A_2}{A_1} + \frac{A_3}{A_2}, \quad (\text{B.71})$$

Debido a las magnitudes $A_1 \sim 10^{-2}$, $A_2 \sim 10^{-5}$ y $A_3 \sim 10^{-9}$, todos los radicandos señalados en los tres conjuntos de raíces cúbicas (B.63) a (B.71) son positivos. Por consiguiente, tenemos que el primer conjunto de raíces cúbicas, el dado por (B.63) a (B.65), consta de una raíz real y dos complejas conjugadas; mientras que el segundo y tercer conjuntos constan cada uno de tres raíces reales. Además, el conjunto de raíces (B.66) a (B.68) es el único, cuando $A_3 = 0$, que se reduce a las raíces \bar{s}_3 , \bar{s}_4 y \bar{s}_5 halladas en el caso particular. Por estas razones, el conjunto (B.66) a (B.68) es el que se considerará para el cálculo de los modos nemáticos longitudinales determinados por la ecuación cúbica (B.31).

B.2.2. Modos longitudinales visco-calóricos y del director

Al sustituir los coeficientes (B.32) a (B.34) en el conjunto de raíces (B.66) a (B.68), dejando sólo los términos dominantes, se obtiene

$$\bar{s}_3 \simeq \frac{1}{2} \left(a_1 + a_3 - \frac{a_6}{a_3} \right) - \frac{1}{2} \sqrt{\left(a_1 + a_3 - \frac{a_6}{a_3} \right)^2 - 4a_1a_3 \left(1 - \frac{R}{R_c} \right)}, \quad (\text{B.72})$$

$$\bar{s}_4 \simeq \frac{1}{2} \left(a_1 + a_3 - \frac{a_6}{a_3} \right) + \frac{1}{2} \sqrt{\left(a_1 + a_3 - \frac{a_6}{a_3} \right)^2 - 4a_1a_3 \left(1 - \frac{R}{R_c} \right)}, \quad (\text{B.73})$$

$$\bar{s}_5 \simeq a_5 + \frac{a_6}{a_3}, \quad (\text{B.74})$$

en donde

$$\frac{R}{R_c} \equiv - \left(\frac{a'_0}{a_1a_3} + \frac{a_0a'_1}{a_1^2a_3} + \frac{a_0a'_1}{a_1a_3^2} \right). \quad (\text{B.75})$$

En (B.75), R recibe el nombre de número de Rayleigh y R_c denota su valor crítico.

Si reescribimos las raíces (B.72), (B.73) y (B.74) en términos de las variables λ_i mediante la relación $\bar{s} \equiv \lambda/\bar{\omega}$, y si en éstas sustituimos los valores de las cantidades pequeñas (4.109), se obtiene

$$\lambda_3 \simeq \frac{1}{2} \left(D_T k^2 + \sigma_3 k^2 - \frac{\Omega^2 K_I k^2}{\rho_0 \sigma_3} \right) - \frac{1}{2} \sqrt{\left(D_T k^2 + \sigma_3 k^2 - \frac{\Omega^2 K_I k^2}{\rho_0 \sigma_3} \right)^2 - 4D_T k^2 \sigma_3 k^2 \left(1 - \frac{R}{R_c} \right)}, \quad (\text{B.76})$$

$$\lambda_4 \simeq \frac{1}{2} \left(D_T k^2 + \sigma_3 k^2 - \frac{\Omega^2 K_I k^2}{\rho_0 \sigma_3} \right) + \frac{1}{2} \sqrt{\left(D_T k^2 + \sigma_3 k^2 - \frac{\Omega^2 K_I k^2}{\rho_0 \sigma_3} \right)^2 - 4D_T k^2 \sigma_3 k^2 \left(1 - \frac{R}{R_c} \right)}, \quad (\text{B.77})$$

$$\lambda_5 \simeq \frac{K_I k^2}{\gamma_1} + \frac{\Omega^2 K_I k^2}{\rho_0 \sigma_3}, \quad (\text{B.78})$$

en donde el cociente R/R_c dado por (B.75) queda como

$$\frac{R}{R_c} \equiv - \left(\frac{gX\beta}{D_T \sigma_3} \frac{k_\perp^2}{k^6} + \frac{g\alpha\beta\Omega\chi_a}{D_T^2 \sigma_3} \frac{k_\perp^2}{k^6} + \frac{g\alpha\beta\Omega\chi_a}{D_T \sigma_3^2} \frac{k_\perp^2}{k^6} \right). \quad (\text{B.79})$$

B.2.2.1. Límite del fluido simple en un sistema de Rayleigh-Bénard

Consideraremos primero el límite de un fluido simple en el mismo estado estacionario de no equilibrio aquí considerado. En esta situación, de acuerdo con las cantidades pequeñas (4.109), $A_3 = 0$ y la ecuación cúbica (B.31) se simplifica como

$$(\bar{s}^2 + A_1 \bar{s} + A_2) \bar{s} = 0, \quad (\text{B.80})$$

en donde

$$A_1 \equiv -a_1 - a_3, \quad (\text{B.81})$$

$$A_2 \equiv a_1 a_3 + a'_0. \quad (\text{B.82})$$

Al considerar las raíces \bar{s}_3 , \bar{s}_4 y \bar{s}_5 halladas en el caso particular, que $\bar{s} \equiv \lambda/\bar{\omega}$ y, como se señaló en la Subsección 3.2.5, $D_T \rightarrow \chi$, $\sigma_3 \rightarrow \nu$, puede mostrarse que las soluciones de (B.80) son

$$\lambda_3 = \frac{1}{2} (\chi k^2 + \nu k^2) - \frac{1}{2} \sqrt{(\chi k^2 + \nu k^2)^2 - 4\chi k^2 \nu k^2 \left(1 - \frac{R}{R_c}\right)}, \quad (\text{B.83})$$

$$\lambda_4 = \frac{1}{2} (\chi k^2 + \nu k^2) + \frac{1}{2} \sqrt{(\chi k^2 + \nu k^2)^2 - 4\chi k^2 \nu k^2 \left(1 - \frac{R}{R_c}\right)}, \quad (\text{B.84})$$

$$\lambda_5 = 0,$$

en donde

$$\frac{R}{R_c} \equiv - \frac{gX\beta}{\nu\chi} \frac{k_\perp^2}{k^6}. \quad (\text{B.85})$$

Las raíces (B.83) y (B.84) corresponden con las ecuaciones (11) reportadas en las referencia [63]. Además, como se señala en esa misma referencia, cuando se alcanza el estado de convección ($R = R_c$), estas raíces se reducen a $\lambda_3 = 0$ y $\lambda_4 = \chi k^2 + \nu k^2$; en tanto que el estado de equilibrio termodinámico ($R = 0$), $\lambda_3 = \chi k^2$ y $\lambda_4 = \nu k^2$.

B.2.3. Forma alternativa de aproximar las raíces de $p_{YY}^L(\lambda)$

A continuación aproximaremos las raíces del polinomio cúbico $p_{YY}^L(\lambda)$ de una forma diferente, tomando como base la idea sugerida en la referencia [61] para el cálculo de los modos hidrodinámicos de un fluido simple en el estado de equilibrio. Para ello, al sustituir los coeficientes A_i (con $i = 1, 2, 3$), dados por las expresiones (B.32)-(B.34), en la ecuación cúbica (B.31), ésta queda escrita como

$$\begin{aligned} \bar{s}^3 + (-a_1 - a_3 - a_5) \bar{s}^2 + (a_1 a_3 + a_1 a_5 + a_3 a_5 + a_6 + a'_0) \bar{s} \\ - a_1 a_3 a_5 - a_1 a_6 - a'_0 a_5 + a_0 a'_1 = 0. \end{aligned} \quad (\text{B.86})$$

Puede mostrarse fácilmente que la ecuación polinomial cúbica

$$\bar{s}^3 + (W_1 + W_2)\bar{s}^2 + W_3\left(1 + \frac{W_1W_2}{W_3}\right)\bar{s} + W_1W_3 = 0, \quad (\text{B.87})$$

en la que W_1, W_2, W_3 son cantidades reales, se factoriza en la forma

$$(\bar{s}^2 + W_2\bar{s} + W_3)(\bar{s} + W_1) = 0; \quad (\text{B.88})$$

y en consecuencia, sus tres raíces son

$$\bar{s}_3 = \frac{1}{2}\left(-W_2 - \sqrt{W_2^2 - 4W_3}\right), \quad (\text{B.89})$$

$$\bar{s}_4 = \frac{1}{2}\left(-W_2 + \sqrt{W_2^2 - 4W_3}\right), \quad (\text{B.90})$$

$$\bar{s}_5 = -W_1. \quad (\text{B.91})$$

Mostraremos que la ecuación cúbica (B.86) puede escribirse en la forma (B.87). En efecto, al comparar ambas ecuaciones pueden hacerse las identificaciones

$$W_1 + W_2 = -a_1 - a_3 - a_5, \quad (\text{B.92})$$

$$W_3 = a_1a_3 + a_1a_5 + a_3a_5 + a_6 + a'_0, \quad (\text{B.93})$$

$$W_1W_3 = -a_1a_3a_5 - a_1a_6 - a'_0a_5 + a_0a'_1. \quad (\text{B.94})$$

La sustitución de (B.93) en (B.94) permite escribir

$$W_1 = \frac{-a_1a_3a_5 - a_1a_6 - a'_0a_5 + a_0a'_1}{a_1a_3 + a_1a_5 + a_3a_5 + a_6 + a'_0}. \quad (\text{B.95})$$

Recordemos que los órdenes de magnitud de las cantidades pequeñas (4.109) son $a_0 \sim 10^{-21}$, $a'_0 \sim 10^{-21}$, $a''_0 \sim 10^{-24}$, $a_1 \sim 10^{-3}$, $a'_1 \sim 10^{-3}$, $a_2 \sim 10^{-2}$, $a_3 \sim 10^{-2}$, $a_5 \sim 10^{-5}$, $a_6 \sim 10^{-6}$ y además $\bar{\omega} \sim 10^{10}$. En el denominador de (B.95) a_1a_3 es el término dominante, por lo que puede aproximarse a W_1 como

$$W_1 \simeq -a_5 - \frac{a_6}{a_3} - \frac{a'_0a_5}{a_1a_3} + \frac{a_0a'_1}{a_1a_3}. \quad (\text{B.96})$$

Al sustituir (B.96) en (B.92) se obtiene

$$W_2 \simeq -a_1 - a_3 + \frac{a_6}{a_3} + \frac{a'_0a_5}{a_1a_3} - \frac{a_0a'_1}{a_1a_3}. \quad (\text{B.97})$$

Si se consideran las magnitudes de las cantidades pequeñas, puede verificarse que los órdenes de magnitud de las relaciones (B.96), (B.97) y (B.93) son, respectivamente, $W_1 \sim 10^{-4}$, $W_2 \sim 10^{-2}$ y $W_3 \sim 10^{-5}$; en consecuencia, $W_1W_2/W_3 \sim 10^{-1}$, de modo que en el coeficiente del término lineal de (B.87) puede hacerse $W_3(1 + W_1W_2/W_3) \simeq W_3$. Por consiguiente, (B.86) es factorizable en la forma (B.88) y sus raíces, de acuerdo con las relaciones (B.89)-(B.91) y los coeficientes (B.93), (B.96), (B.97), son

$$\begin{aligned} \bar{s}_3 \simeq & \frac{1}{2}\left(a_1 + a_3 - \frac{a_6}{a_3} - \frac{a'_0a_5}{a_1a_3} + \frac{a_0a'_1}{a_1a_3}\right) \\ & - \frac{1}{2}\sqrt{\left(a_1 + a_3 - \frac{a_6}{a_3} - \frac{a'_0a_5}{a_1a_3} + \frac{a_0a'_1}{a_1a_3}\right)^2 - 4(a_1a_3 + a_1a_5 + a_3a_5 + a_6 + a'_0)}, \end{aligned} \quad (\text{B.98})$$

$$\begin{aligned} \bar{s}_4 &\simeq \frac{1}{2} \left(a_1 + a_3 - \frac{a_6}{a_3} - \frac{a'_0 a_5}{a_1 a_3} + \frac{a_0 a'_1}{a_1 a_3} \right) \\ &+ \frac{1}{2} \sqrt{\left(a_1 + a_3 - \frac{a_6}{a_3} - \frac{a'_0 a_5}{a_1 a_3} + \frac{a_0 a'_1}{a_1 a_3} \right)^2 - 4(a_1 a_3 + a_1 a_5 + a_3 a_5 + a_6 + a'_0)}, \end{aligned} \quad (\text{B.99})$$

$$\bar{s}_5 \simeq a_5 + \frac{a_6}{a_3} + \frac{a'_0 a_5}{a_1 a_3} - \frac{a_0 a'_1}{a_1 a_3}. \quad (\text{B.100})$$

Obsérvese que el radicando de (B.98) y (B.99), que denotaremos como Δ_0 , puede reescribirse como

$$\begin{aligned} \Delta_0 &= \left(a_1 + a_3 - \frac{a_6}{a_3} + \frac{a'_0 a_5}{a_1 a_3} - \frac{a_0 a'_1}{a_1 a_3} \right)^2 - 4a_1 a_3 \left(1 + \frac{a_5}{a_3} + \frac{a_5}{a_1} + \frac{a_6}{a_1 a_3} \right) \\ &- 4a'_0 + \frac{4a'_1 a_0}{a_1} + \frac{4a'_1 a_0}{a_3} - \frac{4a'_0 a_5}{a_1} - \frac{4a'_0 a_5}{a_3} - \frac{4a'_1 a_0 a_6}{a_1 a_3^2} + \frac{4a'_0 a_5 a_6}{a_1 a_3^2}. \end{aligned} \quad (\text{B.101})$$

Dentro de las cantidades pequeñas (4.109), pueden distinguirse dos conjuntos: uno integrado por aquellas que dependen de las fuerzas externas α y g , que son a_0 , a'_0 y a''_0 ; y otro constituido por todas las demás que no dependen de dichas fuerzas, como a_1 , a'_1 , a_2 , a_3 , a_5 y a_6 . Cabe señalar que las del primer grupo cuentan con órdenes de magnitud mucho menores que las del segundo. Con la finalidad de simplificar las raíces (B.98)-(B.100) e indicar en ellas los efectos producidos por las fuerzas externas, las escribiremos en términos de las cantidades pequeñas dominantes de ambos conjuntos. Además, en estas raíces sólo se mostrarán los términos que contienen a las cantidades pequeñas del primer conjunto (las de las fuerzas externas) que estén a una distancia menor, en órdenes de magnitud, respecto a los términos que contienen a las del segundo.

En el primer término (el elevado al cuadrado) del radicando (B.101) y en término fuera del radicando de las expresiones (B.98) y (B.99), tenemos que $a'_0 a_5 (a_1 a_3)^{-1} \sim 10^{-21}$ y $a_0 a'_1 (a_1 a_3)^{-1} \sim 10^{-19}$, comparadas con $a_1 \sim 10^{-3}$, $a_3 \sim 10^{-2}$ y $a_6 (a_3)^{-1} \sim 10^{-4}$, tienen una separación mínima de 10^{17} . En los demás términos del radicando (B.101), los términos dominantes $4a'_0 \sim 10^{-21}$, $4a_0 a'_1 (a_3)^{-1} \sim 10^{-22}$ y $4a_0 a'_1 (a_1)^{-1} \sim 10^{-21}$, con respecto al término también dominante $4a_1 a_3 \sim 10^{-5}$, están a una distancia mínima de 10^{16} . Por otra parte, en (B.100), $a'_0 a_5 (a_1 a_3)^{-1} \sim 10^{-21}$ y $a_0 a'_1 (a_1 a_3)^{-1} \sim 10^{-19}$, con respecto a $a_5 \sim 10^{-5}$ y $a_6 (a_3)^{-1} \sim 10^{-4}$, están a una distancia mínima de 10^{15} . Por lo tanto, al considerar en las raíces (B.98)-(B.100) los términos dominantes que continen productos de las cantidades pequeñas de ambos conjuntos, y además, manteniendo sólo aquellos que contienen a las cantidades pequeñas a_0 y a'_0 (las fuerzas externas) que están a la distancia menor, en órdenes de magnitud, respecto a los que no contienen dichas cantidades, estas raíces pueden simplificarse como

$$\bar{s}_3 \simeq \frac{1}{2} \left(a_1 + a_3 - \frac{a_6}{a_3} \right) - \frac{1}{2} \sqrt{\left(a_1 + a_3 - \frac{a_6}{a_3} \right)^2 - 4a_1 a_3 \left(1 - \frac{R}{R_c} \right)}, \quad (\text{B.102})$$

$$\bar{s}_4 \simeq \frac{1}{2} \left(a_1 + a_3 - \frac{a_6}{a_3} \right) + \frac{1}{2} \sqrt{\left(a_1 + a_3 - \frac{a_6}{a_3} \right)^2 - 4a_1 a_3 \left(1 - \frac{R}{R_c} \right)}, \quad (\text{B.103})$$

$$\bar{s}_5 \simeq a_5 + \frac{a_6}{a_3} + \frac{a_0 a'_1}{a_1 a_3}, \quad (\text{B.104})$$

en donde

$$\frac{R}{R_c} \equiv - \left(\frac{a'_0}{a_1 a_3} - \frac{a'_1 a_0}{a_1^2 a_3} - \frac{a'_1 a_0}{a_1 a_3^2} \right). \quad (\text{B.105})$$

Es menester mencionar que en esta aproximación el cociente hallado R/R_e , dado por la expresión (B.105), es idéntico al encontrado previamente e indicado en (B.75), excepto por los signos del segundo y tercer términos que son opuestos.

Apéndice C

Funciones de autocorrelación y correlación cruzada de las variables longitudinales z_3 y z_5

En este apéndice se hallan las soluciones del sistema de ecuaciones (5.1) en el espacio (\vec{k}, ω) y calculamos las funciones de autocorrelación y correlación cruzada de las variables z_3 y z_5 . Con esta finalidad, aplicamos la transformada de Fourier, con respecto a t , al este sistema para obtener el conjunto de ecuaciones algebraicas

$$\begin{pmatrix} D_T k^2 - i\omega & \frac{\beta X c_s}{(\gamma-1)^{1/2}} & \frac{\alpha \beta \chi_a}{(\gamma-1)^{1/2}} k \\ -(\gamma-1)^{1/2} \frac{g}{c_s} \frac{k^2}{k^2} & \sigma_3 k^2 - i\omega & -\frac{\Omega K_I}{\rho_0 c_s} k^3 \\ 0 & \Omega c_s k & \frac{K_I}{\gamma_1} k^2 - i\omega \end{pmatrix} \begin{pmatrix} z_3(\vec{k}, \omega) \\ z_4(\vec{k}, \omega) \\ z_5(\vec{k}, \omega) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \zeta_3(\vec{k}, \omega) \\ \zeta_4(\vec{k}, \omega) \\ \zeta_5(\vec{k}, \omega) \end{pmatrix}. \quad (\text{C.1})$$

Las soluciones del sistema (C.1) están dadas por

$$\begin{aligned} z_3(\vec{k}, \omega) = & \frac{1}{i(\omega + i\lambda_3)(\omega + i\lambda_4)(\omega + i\lambda_5)} \left[\left(-\omega^2 - ik^2\omega\sigma_3 - \frac{ik^2\omega K_I}{\gamma_1} + \frac{k^4\Omega^2 K_I}{\rho_0} + \frac{k^4 K_I \sigma_3}{\gamma_1} \right) \zeta_3 \right. \\ & \left. + \left(\frac{iX\beta\omega c_s}{\sqrt{\gamma-1}} + \frac{k^2\alpha\beta\Omega c_s \chi_a}{\sqrt{\gamma-1}} - \frac{k^2 X\beta c_s K_I}{\sqrt{\gamma-1}\gamma_1} \right) \zeta_4 + \left(\frac{ik\alpha\beta\omega\chi_a}{\sqrt{\gamma-1}} - \frac{k^3\alpha\beta\sigma_3\chi_a}{\sqrt{\gamma-1}} - \frac{k^3 X\beta\Omega K_I}{\sqrt{\gamma-1}\rho_0} \right) \zeta_5 \right], \end{aligned} \quad (\text{C.2})$$

$$\begin{aligned} z_4(\vec{k}, \omega) = & \frac{1}{i(\omega + i\lambda_3)(\omega + i\lambda_4)(\omega + i\lambda_5)} \left[\left(\frac{g\sqrt{\gamma-1}k_{\perp}^2 K_I}{c_s \gamma_1} - \frac{ig\sqrt{\gamma-1}\omega k_{\perp}^2}{k^2 c_s} \right) \zeta_3 \right. \\ & \left. + \left(-\omega^2 - ik^2\omega D_T - \frac{ik^2\omega K_I}{\gamma_1} + \frac{k^4 D_T K_I}{\gamma_1} \right) \zeta_4 + \left(-\frac{ik^3\omega\Omega K_I}{c_s \rho_0} + \frac{k^5\Omega D_T K_I}{c_s \rho_0} - \frac{g\alpha\beta k_{\perp}^2 \chi_a}{k c_s} \right) \zeta_5 \right], \end{aligned} \quad (\text{C.3})$$

$$z_5(\vec{k}, \omega) = \frac{1}{i(\omega + i\lambda_3)(\omega + i\lambda_4)(\omega + i\lambda_5)} \left[-\frac{g\sqrt{\gamma - 1}\Omega k_{\perp}^2}{k} \zeta_3 + (ik\omega\Omega c_s - k^3\Omega c_s D_T) \zeta_4 \right. \\ \left. + \left(-\omega^2 - ik^2\omega\sigma_3 - ik^2\omega D_T + k^4 D_T \sigma_3 + \frac{gX\beta k_{\perp}^2}{k^2} \right) \zeta_5 \right]. \quad (\text{C.4})$$

El denominador de las expresiones (C.2) a (C.4), que corresponde al polinomio característico $p_{YY}^L(\lambda)$ dado por (4.108), ha sido aproximado al factorizarlo en términos de sus tres raíces (4.134) a (4.135). Recuérdese que $\lambda = i\omega$. Además, los ruidos ζ_3 , ζ_4 and ζ_5 están definidos por las relaciones (A.3) a (A.5) dadas en el Apéndice B.

C.1. Autocorrelación de $z_3(\vec{k}, \omega)$

Mediante (C.2), así como las autocorrelaciones de los ruidos (A.10) a (A.12) y (A.19), puede mostrarse que

$$\langle z_3(\vec{k}, \omega) z_3^*(\vec{k}, \omega) \rangle = 2k_B T_0 \frac{B_{13}\omega^4 + B_{23}\omega^2 + B_{33}}{(\omega^2 + \lambda_3^2)(\omega^2 + \lambda_4^2)(\omega^2 + \lambda_5^2)} \quad (\text{C.5})$$

en donde

$$B_{13} \equiv D_T k^2 \quad (\text{C.6})$$

$$B_{23} \equiv D_T \sigma_3^2 k^6 - \frac{2\Omega^2 D_T K_I k^6}{\rho_0} + \frac{D_T K_I^2 k^6}{\gamma_1^2} + \frac{X^2 \beta^2 c_s^2 k_{\perp}^2 \sigma_3}{\gamma - 1} + \frac{\alpha^2 \beta^2 c_s^2 k_{\perp}^2 \rho_0 \chi_a^2}{(\gamma - 1)\gamma_1} \quad (\text{C.7})$$

$$B_{33} \equiv \frac{\Omega^4 D_T K_I^2 k^{10}}{\rho_0^2} + \frac{2\Omega^2 D_T K_I^2 \sigma_3 k^{10}}{\gamma_1 \rho_0} + \frac{D_T K_I^2 \sigma_3^2 k^{10}}{\gamma_1^2} \\ + \frac{X^2 \beta^2 c_s^2 k_{\perp}^2 K_I^2 k^4}{(\gamma - 1)\rho_0 \gamma_1} \left(\Omega^2 + \frac{\rho_0 \sigma_3}{\gamma_1} \right) + \frac{\alpha^2 \beta^2 c_s^2 k_{\perp}^2 k^4 \sigma_3 \chi_a^2}{\gamma - 1} \left(\Omega^2 + \frac{\rho_0 \sigma_3}{\gamma_1} \right) \quad (\text{C.8})$$

Al separar (C.5) en fracciones parciales se obtiene

$$\langle z_3(\vec{k}, \omega) z_3^*(\vec{k}, \omega) \rangle = k_B T_0 \left[C_{33}(\vec{k}) \frac{2\lambda_3}{\omega^2 + \lambda_3^2} + C_{43}(\vec{k}) \frac{2\lambda_4}{\omega^2 + \lambda_4^2} + C_{53}(\vec{k}) \frac{2\lambda_5}{\omega^2 + \lambda_5^2} \right], \quad (\text{C.9})$$

con

$$C_{33}(\vec{k}) \equiv -\frac{\bar{\lambda}_3 \left[D_T \left(-\sigma_3^2 + \frac{2\Omega^2 K_I}{\rho_0} + \bar{\lambda}_3^2 \right) - \frac{c_p \sigma_3 \hat{k}_{\perp}^2}{T_0} \frac{X^2}{k^4} \right]}{(\bar{\lambda}_4^2 - \bar{\lambda}_3^2)(\bar{\lambda}_3^2 - \bar{\lambda}_5^2)}, \quad (\text{C.10})$$

$$C_{43}(\vec{k}) \equiv \frac{\bar{\lambda}_4 \left[D_T \left(-\sigma_3^2 + \frac{2\Omega^2 K_I}{\rho_0} + \bar{\lambda}_4^2 \right) - \frac{c_p \sigma_3 \hat{k}_{\perp}^2}{T_0} \frac{X^2}{k^4} \right]}{(\bar{\lambda}_4^2 - \bar{\lambda}_3^2)(\bar{\lambda}_4^2 - \bar{\lambda}_5^2)}, \quad (\text{C.11})$$

$$C_{53}(\vec{k}) \equiv \frac{D_T \left(\frac{2\Omega^2 K_I^2 \sigma_3}{\gamma_1 \rho_0} + \frac{\Omega^4 K_I^2}{\rho_0^2} - \sigma_3^2 \bar{\lambda}_5^2 \right) + \frac{c_p \sigma_3 \hat{k}_{\perp}^2}{T_0} \frac{(\alpha^2 \chi_a^2 \Omega^2 + \alpha^2 \chi_a^2 \frac{\sigma_3 \rho_0}{\gamma_1} - X^2 \bar{\lambda}_5^2)}{k^4}}{\bar{\lambda}_5 (\bar{\lambda}_3^2 - \bar{\lambda}_5^2) (\bar{\lambda}_4^2 - \bar{\lambda}_5^2)}, \quad (\text{C.12})$$

en donde $\widehat{k}_\perp \equiv k_\perp/k$ y se han empleado las tasas de decaimiento (5.7) a (5.8) escritas como

$$\lambda_3 \equiv \bar{\lambda}_3 k^2, \quad (\text{C.13})$$

$$\lambda_4 \equiv \bar{\lambda}_4 k^2, \quad (\text{C.14})$$

$$\lambda_5 \equiv \bar{\lambda}_5 k^2, \quad (\text{C.15})$$

siendo

$$\bar{\lambda}_3 \equiv \frac{1}{2} \left(D_T + \sigma - \frac{\Omega^2 K_I}{\rho_0 \sigma_3} \right) - \frac{1}{2} \sqrt{\left(D_T + \sigma_3 - \frac{\Omega^2 K_I}{\rho_0 \sigma_3} \right)^2 - 4D_T \sigma_3 \left(1 - \frac{R}{R_c} \right)}, \quad (\text{C.16})$$

$$\bar{\lambda}_4 \equiv \frac{1}{2} \left(D_T + \sigma - \frac{\Omega^2 K_I}{\rho_0 \sigma_3} \right) + \frac{1}{2} \sqrt{\left(D_T + \sigma_3 - \frac{\Omega^2 K_I}{\rho_0 \sigma_3} \right)^2 - 4D_T \sigma_3 \left(1 - \frac{R}{R_c} \right)}, \quad (\text{C.17})$$

$$\bar{\lambda}_5 \equiv \frac{K_I}{\gamma_1} + \frac{\Omega^2 K_I}{\rho_0 \sigma_3}. \quad (\text{C.18})$$

Además debe mencionarse que, en la deducción de los coeficientes (C.10) a (C.12), sólo se han considerado los términos dominantes.

En las definiciones (4.88) indicadas en el Capítulo 4, se observa que $z_3(\vec{k}, \omega) \equiv (\rho_0 T_0 / c_p)^{1/2} \delta \tilde{s}(\vec{k}, \omega)$. La función de autocorrelación de esta variable es la densidad espectral $S_{ss}(\vec{k}, \omega)$ de la autocorrelación $\langle \delta \tilde{s}(\vec{k}, t) \delta \tilde{s}^*(\vec{k}, 0) \rangle$. Por consiguiente, la ecuación (C.9) puede escribirse como

$$\begin{aligned} S_{ss}(\vec{k}, \omega) &= \langle \delta \tilde{s}(\vec{k}, \omega) \delta \tilde{s}^*(\vec{k}, \omega) \rangle \\ &= k_B \frac{c_p}{\rho_0} \left[C_{33}(\vec{k}) \frac{2\lambda_3}{\omega^2 + \lambda_3^2} + C_{43}(\vec{k}) \frac{2\lambda_4}{\omega^2 + \lambda_4^2} + C_{53}(\vec{k}) \frac{2\lambda_5}{\omega^2 + \lambda_5^2} \right]. \end{aligned} \quad (\text{C.19})$$

C.2. Autocorrelación de $z_5(\vec{k}, \omega)$

Al considerar (C.4), así como las autocorrelaciones de los ruidos (A.10) a (A.12) y (A.19), puede mostrarse que

$$\langle z_5(\vec{k}, \omega) z_5^*(\vec{k}, \omega) \rangle = 2k_B T_0 \frac{B_{15} \omega^4 + B_{25} \omega^2 + B_{35}}{(\omega^2 + \lambda_3^2)(\omega^2 + \lambda_4^2)(\omega^2 + \lambda_5^2)}, \quad (\text{C.20})$$

en donde

$$B_{15} \equiv \frac{c_s^2 k_\perp^2 \rho_0}{k^2 \gamma_1} \quad (\text{C.21})$$

$$B_{25} \equiv k^2 \Omega^2 c_s^2 k_\perp^2 \sigma_3 + \frac{k^2 c_s^2 k_\perp^2 \rho_0 \sigma_3^2}{\gamma_1} + \frac{k^2 c_s^2 D_T^2 k_\perp^2 \rho_0}{\gamma_1} - \frac{2gX\beta c_s^2 k_\perp^4 \rho_0}{k^4 \gamma_1} \quad (\text{C.22})$$

$$B_{35} \equiv k^6 \Omega^2 c_s^2 k_\perp^2 D_T^2 \sigma_3 + \frac{k^6 c_s^2 k_\perp^2 D_T^2 \rho_0 \sigma_3^2}{\gamma_1} + \frac{2gX\beta c_s^2 D_T k_\perp^4 \rho_0 \sigma_3}{\gamma_1} + k^2 D_T \left(\frac{g^2 \gamma \Omega^2 k_\perp^4}{k^2} - \frac{g^2 \Omega^2 k_\perp^4}{k^2} \right). \quad (\text{C.23})$$

Por otra parte, al separar la última relación en fracciones parciales, se obtiene

$$\langle z_5(\vec{k}, \omega) z_5^*(\vec{k}, \omega) \rangle = k_B T_0 \left[C_{35}(\vec{k}) \frac{2\lambda_3}{\omega^2 + \lambda_3^2} + C_{45}(\vec{k}) \frac{2\lambda_4}{\omega^2 + \lambda_4^2} + C_{55}(\vec{k}) \frac{2\lambda_5}{\omega^2 + \lambda_5^2} \right], \quad (\text{C.24})$$

con

$$C_{35}(\vec{k}) \equiv \frac{c_s^2}{\bar{\lambda}_3 (\bar{\lambda}_3^2 - \bar{\lambda}_4^2) (\bar{\lambda}_3^2 - \bar{\lambda}_5^2)} \left[\left(\Omega^2 D_T^2 \sigma_3 - \frac{\rho_0 \sigma_3^2 \bar{\lambda}_3^2}{\gamma_1} - \Omega^2 \sigma_3 \bar{\lambda}_3^2 + \frac{\rho_0 \bar{\lambda}_3^4}{\gamma_1} \right) \frac{\hat{k}_\perp^2}{k^2} + \left((\gamma - 1) \frac{g^2 \Omega^2 D_T}{c_s^2} + \frac{2gX\beta D_T \rho_0 \sigma_3}{\gamma_1} + \frac{2gX\beta \rho_0 \bar{\lambda}_3^2}{\gamma_1} \right) \frac{\hat{k}_\perp^4}{k^6} \right], \quad (\text{C.25})$$

$$C_{45}(\vec{k}) \equiv -\frac{c_s^2}{\bar{\lambda}_4 (\bar{\lambda}_4^2 - \bar{\lambda}_3^2) (\bar{\lambda}_4^2 - \bar{\lambda}_5^2)} \left[\left(-\Omega^2 D_T^2 \sigma_3 + \frac{\rho_0 \sigma_3^2 \bar{\lambda}_4^2}{\gamma_1} + \Omega^2 \sigma_3 \bar{\lambda}_4^2 - \frac{\rho_0 \bar{\lambda}_4^4}{\gamma_1} \right) \frac{\hat{k}_\perp^2}{k^2} + \left(-(\gamma - 1) \frac{g^2 \Omega^2 D_T}{c_s^2} - \frac{2gX\beta D_T \rho_0 \sigma_3}{\gamma_1} - \frac{2gX\beta \rho_0 \bar{\lambda}_4^2}{\gamma_1} \right) \frac{\hat{k}_\perp^4}{k^6} \right], \quad (\text{C.26})$$

$$C_{55}(\vec{k}) \equiv \frac{c_s^2}{\bar{\lambda}_5 (\bar{\lambda}_3^2 - \bar{\lambda}_5^2) (\bar{\lambda}_3^2 - \bar{\lambda}_5^2)} \left[\left(\frac{D_T^2 \rho_0 \sigma_3^2}{\gamma_1} + \Omega^2 D_T^2 \sigma_3 - \frac{\rho_0 \sigma_3^2 \bar{\lambda}_5^2}{\gamma_1} - \Omega^2 \sigma_3 \bar{\lambda}_5^2 \right) \frac{\hat{k}_\perp^2}{k^2} + \left(\frac{g^2 \gamma \Omega^2 D_T}{c_s^2} - \frac{g^2 \Omega^2 D_T}{c_s^2} + \frac{2gX\beta D_T \rho_0 \sigma_3}{\gamma_1} \right) \frac{\hat{k}_\perp^4}{k^6} \right]. \quad (\text{C.27})$$

En la deducción de los coeficientes (C.25) a (C.27) sólo se han considerado los términos dominantes.

De nueva cuenta, de las definiciones (4.88) del Capítulo 4, se tiene que $z_5(\vec{k}, \omega) \equiv (\rho_0 c_s^2 / k^2)^{1/2} \delta \tilde{f}_1(\vec{k}, \omega)$. La función de autocorrelación de esta variable es la densidad espectral $S_{f_1 f_1}(\vec{k}, \omega)$ de la autocorrelación $\langle \delta \tilde{f}_1(\vec{k}, t) \delta \tilde{f}_1^*(\vec{k}, 0) \rangle$. De esta manera, la ecuación (C.24) puede ser escrita como

$$S_{f_1 f_1}(\vec{k}, \omega) = \langle \delta \tilde{f}_1(\vec{k}, \omega) \delta \tilde{f}_1^*(\vec{k}, \omega) \rangle = k_B \frac{T_0 k^2}{\rho_0 c_s^2} \left[C_{35}(\vec{k}) \frac{2\lambda_3}{\omega^2 + \lambda_3^2} + C_{45}(\vec{k}) \frac{2\lambda_4}{\omega^2 + \lambda_4^2} + C_{55}(\vec{k}) \frac{2\lambda_5}{\omega^2 + \lambda_5^2} \right]. \quad (\text{C.28})$$

C.3. Correlaciones cruzadas entre $z_3(\vec{k}, \omega)$ y $z_5(\vec{k}, \omega)$

Similarmente, a partir de las ecuaciones (C.2) y (C.4), además de las autocorrelaciones de los ruidos (A.10) a (A.12) y (A.19), puede mostrarse que

$$\langle z_3(\vec{k}, \omega) z_5^*(\vec{k}, \omega) \rangle = 2k_B T_0 \frac{B_{135} \omega^3 + B_{235} \omega^2 + B_{335} \omega + B_{435}}{(\omega^2 + \lambda_3^2) (\omega^2 + \lambda_4^2) (\omega^2 + \lambda_5^2)} \quad (\text{C.29})$$

y

$$\langle z_5(\vec{k}, \omega) z_3^*(\vec{k}, \omega) \rangle = 2k_B T_0 \frac{B_{153} \omega^3 + B_{253} \omega^2 + B_{353} \omega + B_{453}}{(\omega^2 + \lambda_3^2) (\omega^2 + \lambda_4^2) (\omega^2 + \lambda_5^2)}, \quad (\text{C.30})$$

en donde

$$B_{135} = -B_{153} \equiv -\frac{i\alpha\beta c_s^2 k_\perp^2 \rho_0 \chi_a}{k\sqrt{\gamma-1}\gamma_1} \quad (\text{C.31})$$

$$B_{235} = B_{253} \equiv \frac{kX\beta\Omega c_s^2 k_\perp^2 \sigma_3}{\sqrt{\gamma-1}} - \frac{k\alpha\beta c_s^2 k_\perp^2 D_T \rho_0 \chi_a}{\sqrt{\gamma-1}\gamma_1} + \frac{kX\beta\Omega c_s^2 k_\perp^2 K_I}{\sqrt{\gamma-1}\gamma_1} + gk\sqrt{\gamma-1}\Omega D_T k_\perp^2 \quad (\text{C.32})$$

$$\begin{aligned}
B_{335} = -B_{353} \equiv & -\frac{ik^3 X\beta\Omega c_s^2 k_\perp^2 D_T \sigma_3}{\sqrt{\gamma-1}} - \frac{ik^3 \alpha\beta\Omega^2 c_s^2 k_\perp^2 \sigma_3 \chi_a}{\sqrt{\gamma-1}} - \frac{ik^3 \alpha\beta c_s^2 k_\perp^2 \rho_0 \sigma_3^2 \chi_a}{\sqrt{\gamma-1}\gamma_1} + igk^3 \sqrt{\gamma-1} \Omega D_T k_\perp^2 \sigma_3 \\
& - \frac{ik^3 X\beta\Omega c_s^2 k_\perp^2 D_T K_I}{\sqrt{\gamma-1}\gamma_1} + \frac{igk^3 \sqrt{\gamma-1} \Omega D_T k_\perp^2 K_I}{\gamma_1} + \frac{igX\alpha\beta^2 c_s^2 k_\perp^4 \rho_0 \chi_a}{k^3 \sqrt{\gamma-1}\gamma_1}
\end{aligned} \quad (C.33)$$

$$\begin{aligned}
B_{435} = B_{453} \equiv & -\frac{k^5 \alpha\beta\Omega^2 c_s^2 D_T k_\perp^2 \sigma_3 \chi_a}{\sqrt{\gamma-1}} - \frac{k^5 \alpha\beta c_s^2 D_T k_\perp^2 \rho_0 \sigma_3^2 \chi_a}{\sqrt{\gamma-1}\gamma_1} - \frac{gk^5 \sqrt{\gamma-1} \Omega^3 D_T k_\perp^2 K_I}{\rho_0} \\
& - \frac{gk^5 \sqrt{\gamma-1} \Omega D_T k_\perp^2 K_I \sigma_3}{\gamma_1} - \frac{gX\alpha\beta^2 c_s^2 k_\perp^4 \rho_0 \sigma_3 \chi_a}{k\sqrt{\gamma-1}\gamma_1} - \frac{gX^2 \beta^2 \Omega c_s^2 k_\perp^4 K_I}{k\sqrt{\gamma-1}\gamma_1}
\end{aligned} \quad (C.34)$$

La separación en fracciones parciales de las ecuaciones (C.29) y (C.30) es

$$\left\langle z_3(\vec{k}, \omega) z_5^*(\vec{k}, \omega) \right\rangle = k_B T_0 \left[C_{335}(\vec{k}, \omega) \frac{2\lambda_3}{\omega^2 + \lambda_3^2} + C_{435}(\vec{k}, \omega) \frac{2\lambda_4}{\omega^2 + \lambda_4^2} + C_{535}(\vec{k}, \omega) \frac{2\lambda_5}{\omega^2 + \lambda_5^2} \right] \quad (C.35)$$

y

$$\left\langle z_5(\vec{k}, \omega) z_3^*(\vec{k}, \omega) \right\rangle = k_B T_0 \left[C_{353}(\vec{k}, \omega) \frac{2\lambda_3}{\omega^2 + \lambda_3^2} + C_{453}(\vec{k}, \omega) \frac{2\lambda_4}{\omega^2 + \lambda_4^2} + C_{553}(\vec{k}, \omega) \frac{2\lambda_5}{\omega^2 + \lambda_5^2} \right], \quad (C.36)$$

siendo

$$\begin{aligned}
C_{335} \equiv & \frac{\beta c_s^2}{\sqrt{\gamma-1}\lambda_3 (\lambda_3^2 - \lambda_4^2) (\lambda_3^2 - \lambda_5^2)} \left[-X\Omega\sigma_3\bar{\lambda}_3^2 - \frac{X\Omega K_I \bar{\lambda}_3^2}{\gamma_1} - \alpha\chi_a \Omega^2 D_T \sigma_3 + \frac{\alpha\chi_a D_T \rho_0 \bar{\lambda}_3^2}{\gamma_1} \right. \\
& \left. - \frac{\alpha\chi_a D_T \rho_0 \sigma_3^2}{\gamma_1} + \frac{i\omega}{k^2} \left(-X\Omega D_T \sigma_3 - \alpha\chi_a \Omega^2 \sigma_3 + \frac{\alpha\chi_a \rho_0 \bar{\lambda}_3^2}{\gamma_1} - \frac{\alpha\chi_a \rho_0 \sigma_3^2}{\gamma_1} \right) \right] \frac{\hat{k}_\perp^2}{k^3},
\end{aligned} \quad (C.37)$$

$$\begin{aligned}
C_{435} \equiv & \frac{\beta c_s^2}{\sqrt{\gamma-1}\lambda_4 (\lambda_3^2 - \lambda_4^2) (\lambda_4^2 - \lambda_5^2)} \left[X\Omega\sigma_3\bar{\lambda}_4^2 + \frac{X\Omega K_I \bar{\lambda}_4^2}{\gamma_1} + \alpha\chi_a \Omega^2 D_T \sigma_3 - \frac{\alpha\chi_a D_T \rho_0 \bar{\lambda}_4^2}{\gamma_1} \right. \\
& \left. + \frac{\alpha\chi_a D_T \rho_0 \sigma_3^2}{\gamma_1} + \frac{i\omega}{k^2} \left(X\Omega D_T \sigma_3 + \alpha\chi_a \Omega^2 \sigma_3 - \frac{\alpha\chi_a \rho_0 \bar{\lambda}_4^2}{\gamma_1} + \frac{\alpha\chi_a \rho_0 \sigma_3^2}{\gamma_1} \right) \right] \frac{\hat{k}_\perp^2}{k^3},
\end{aligned} \quad (C.38)$$

$$\begin{aligned}
C_{535} \equiv & \frac{\beta c_s^2}{\sqrt{\gamma-1}\lambda_5 (\lambda_3^2 - \lambda_5^2) (\lambda_4^2 - \lambda_5^2)} \left[-X\Omega\sigma_3\bar{\lambda}_5^2 - \alpha\chi_a \Omega^2 D_T \sigma_3 - \frac{\alpha\chi_a D_T \rho_0 \sigma_3^2}{\gamma_1} \right. \\
& \left. + \frac{i\omega}{k^2} \left(-X\Omega D_T \sigma_3 - \alpha\chi_a \Omega^2 \sigma_3 - \frac{\alpha\chi_a \rho_0 \sigma_3^2}{\gamma_1} \right) \right] \frac{\hat{k}_\perp^2}{k^3},
\end{aligned} \quad (C.39)$$

$$\begin{aligned}
C_{353} \equiv & \frac{\beta c_s^2}{\sqrt{\gamma-1}\lambda_3 (\lambda_3^2 - \lambda_4^2) (\lambda_3^2 - \lambda_5^2)} \left[-X\Omega\sigma_3\bar{\lambda}_3^2 - \frac{X\Omega K_I \bar{\lambda}_3^2}{\gamma_1} - \alpha\chi_a \Omega^2 D_T \sigma_3 + \frac{\alpha\chi_a D_T \rho_0 \bar{\lambda}_3^2}{\gamma_1} \right. \\
& \left. - \frac{\alpha\chi_a D_T \rho_0 \sigma_3^2}{\gamma_1} + \frac{i\omega}{k^2} \left(X\Omega D_T \sigma_3 + \alpha\chi_a \Omega^2 \sigma_3 + \frac{\alpha\chi_a \rho_0 \sigma_3^2}{\gamma_1} - \frac{\alpha\chi_a \rho_0 \bar{\lambda}_3^2}{\gamma_1} \right) \right] \frac{\hat{k}_\perp^2}{k^3},
\end{aligned} \quad (C.40)$$

$$\begin{aligned}
C_{453} \equiv & \frac{\beta c_s^2}{\sqrt{\gamma-1}\lambda_4 (\lambda_3^2 - \lambda_4^2) (\lambda_4^2 - \lambda_5^2)} \left[X\Omega\sigma_3\bar{\lambda}_4^2 + \frac{X\Omega K_I \bar{\lambda}_4^2}{\gamma_1} + \alpha\chi_a \Omega^2 D_T \sigma_3 - \frac{\alpha\chi_a D_T \rho_0 \bar{\lambda}_4^2}{\gamma_1} \right. \\
& \left. + \frac{\alpha\chi_a D_T \rho_0 \sigma_3^2}{\gamma_1} + \frac{i\omega}{k^2} \left(-X\Omega D_T \sigma_3 - \alpha\Omega^2 \sigma_3 \chi_a + \frac{\alpha\chi_a \rho_0 \bar{\lambda}_4^2}{\gamma_1} - \frac{\alpha\chi_a \rho_0 \sigma_3^2}{\gamma_1} \right) \right] \frac{\hat{k}_\perp^2}{k^3},
\end{aligned} \quad (C.41)$$

$$C_{553} \equiv \frac{\beta c_s^2}{\sqrt{\gamma - 1} \bar{\lambda}_5 (\bar{\lambda}_3^2 - \bar{\lambda}_5^2) (\bar{\lambda}_4^2 - \bar{\lambda}_5^2)} \left[-X \Omega \sigma_3 \bar{\lambda}_5^2 - \alpha \chi_a \Omega^2 D_T \sigma_3 - \frac{\alpha \chi_a D_T \rho_0 \sigma_3^2}{\gamma_1} \right. \\ \left. + \frac{i\omega}{k^2} \left(X \Omega D_T \sigma_3 + \alpha \chi_a \Omega^2 \sigma_3 + \frac{\alpha \chi_a \rho_0 \sigma_3^2}{\gamma_1} \right) \right] \frac{\hat{k}_1^2}{k^3}, \quad (\text{C.42})$$

donde nuevamente, en la deducción de los coeficientes (C.31) a (C.34) sólo se han considerado los términos dominantes.

Más adelante se emplearán las diferencias entre (C.40) y (C.37), (C.41) y (C.38), así como (C.42) y (C.39). Estas cantidades son

$$C_{353}(\vec{k}, \omega) - C_{335}(\vec{k}, \omega) \equiv \frac{2i\omega \beta c_s^2 \left(X \Omega D_T \sigma_3 + \alpha \chi_a \Omega^2 \sigma_3 - \frac{\alpha \chi_a \rho_0 \bar{\lambda}_3^2}{\gamma_1} + \frac{\alpha \chi_a \rho_0 \sigma_3^2}{\gamma_1} \right) \frac{\hat{k}_1^2}{k^5}}{\sqrt{\gamma - 1} \bar{\lambda}_3 (\bar{\lambda}_3^2 - \bar{\lambda}_4^2) (\bar{\lambda}_3^2 - \bar{\lambda}_5^2)}, \quad (\text{C.43})$$

$$C_{453}(\vec{k}, \omega) - C_{435}(\vec{k}, \omega) \equiv \frac{2i\omega \beta c_s^2 \left(-X \Omega D_T \sigma_3 - \alpha \chi_a \Omega^2 \sigma_3 + \frac{\alpha \chi_a \rho_0 \bar{\lambda}_4^2}{\gamma_1} - \frac{\alpha \chi_a \rho_0 \sigma_3^2}{\gamma_1} \right) \frac{\hat{k}_1^2}{k^5}}{\sqrt{\gamma - 1} \bar{\lambda}_4 (\bar{\lambda}_3^2 - \bar{\lambda}_4^2) (\bar{\lambda}_4^2 - \bar{\lambda}_5^2)}, \quad (\text{C.44a})$$

$$C_{553}(\vec{k}, \omega) - C_{535}(\vec{k}, \omega) \equiv \frac{2i\omega \beta c_s^2 \left(X \Omega D_T \sigma_3 + \alpha \chi_a \Omega^2 \sigma_3 + \frac{\alpha \chi_a \rho_0 \sigma_3^2}{\gamma_1} \right) \frac{\hat{k}_1^2}{k^5}}{\sqrt{\gamma - 1} \bar{\lambda}_5 (\bar{\lambda}_3^2 - \bar{\lambda}_5^2) (\bar{\lambda}_4^2 - \bar{\lambda}_5^2)}. \quad (\text{C.45})$$

Como ya se ha señalado, de las definiciones (4.88) indicadas en el Capítulo 4, se tiene que $z_3(\vec{k}, \omega) \equiv (\rho_0 T_0 / c_p)^{1/2} \delta \tilde{s}(\vec{k}, \omega)$ y $z_5(\vec{k}, \omega) \equiv (\rho_0 c_s^2 / k^2)^{1/2} \delta \tilde{f}_1(\vec{k}, \omega)$. Las funciones de correlación cruzada de estas variables son las densidades espectrales $S_{s f_1}(\vec{k}, \omega)$ y $S_{f_1 s}(\vec{k}, \omega)$, respectivamente de las correlaciones cruzadas $\langle \delta \tilde{s}(\vec{k}, t) \delta \tilde{f}_1^*(\vec{k}, 0) \rangle$ y $\langle \delta \tilde{f}_1(\vec{k}, t) \delta \tilde{s}^*(\vec{k}, 0) \rangle$. Por consiguiente, las ecuaciones (C.29) y (C.30) dan lugar a

$$S_{s f_1}(\vec{k}, \omega) = \langle \delta \tilde{s}(\vec{k}, \omega) \delta \tilde{f}_1^*(\vec{k}, \omega) \rangle = \frac{k_B T_0 k}{\rho_0 c_s} \left(\frac{c_p}{T_0} \right)^{1/2} \left[C_{335}(\vec{k}, \omega) \frac{2\lambda_3}{\omega^2 + \lambda_3^2} \right. \\ \left. + C_{435}(\vec{k}, \omega) \frac{2\lambda_4}{\omega^2 + \lambda_4^2} + C_{535}(\vec{k}, \omega) \frac{2\lambda_5}{\omega^2 + \lambda_5^2} \right] \quad (\text{C.46})$$

y

$$S_{f_1 s}(\vec{k}, \omega) = \langle \delta \tilde{f}_1(\vec{k}, \omega) \delta \tilde{s}^*(\vec{k}, \omega) \rangle = \frac{k_B T_0 k}{\rho_0 c_s} \left(\frac{c_p}{T_0} \right)^{1/2} \left[C_{353}(\vec{k}, \omega) \frac{2\lambda_3}{\omega^2 + \lambda_3^2} \right. \\ \left. + C_{453}(\vec{k}, \omega) \frac{2\lambda_4}{\omega^2 + \lambda_4^2} + C_{553}(\vec{k}, \omega) \frac{2\lambda_5}{\omega^2 + \lambda_5^2} \right]. \quad (\text{C.47})$$

Apéndice D

Factor de estructura dinámico de un nemático en un sistema de Rayleigh-Bénard

En este apéndice se calculará el factor de estructura dinámico de un nemático en un estado estacionario de no equilibrio correspondiente al de un sistema de Rayleigh-Bénard, tomando en consideración una geométrica de dispersión específica. En la Subsección 3.3.1, se mostró que para un medio nemático dispersivo no magnético, tampoco conductor, ni absorbente, la componente para las polarizaciones inicial \hat{i} y final \hat{f} de las fluctuaciones del tensor dieléctrico nemático están dadas por la relación (3.19)

$$\begin{aligned} \delta\epsilon_{if}(\vec{r}, t) &= \hat{i} \cdot \hat{f} \delta\epsilon_{\perp}(\vec{r}, t) + i_0 f_0 \delta\epsilon_{\alpha}(\vec{r}, t) \\ &+ \epsilon_{\alpha}(\vec{r}, t) \sum_{\alpha=1,2} (i_{\alpha} f_0 + i_0 f_{\alpha}) \delta n_{\alpha}(\vec{r}, t), \end{aligned} \quad (\text{D.1})$$

en donde $i_0 \equiv \hat{i} \cdot \vec{n}_0$, $f_0 \equiv \hat{f} \cdot \vec{n}_0$, $i_{\alpha} \equiv \hat{e}_{\alpha} \cdot \hat{i}$, $f_{\alpha} \equiv \hat{e}_{\alpha} \cdot \hat{f}$, siendo $\hat{e}_2 \equiv (\vec{n}_0 \times \vec{k}) k_{\perp}^{-1}$ y $\hat{e}_1 \equiv \hat{e}_2 \times \vec{n}_0$.

Supondremos que (D.1) sigue cumpliéndose en este estado estacionario de no equilibrio; consecuentemente, en esta relación \vec{n}_0 ahora representa la orientación inicial del campo director en dicho estado. Además, consideraremos que, como se hace en el estado de equilibrio termodinámico [12], en este estado estacionario los coeficientes dieléctricos $\epsilon_{\parallel}^{st}$ y ϵ_{\perp}^{st} son, en general, funciones de la densidad ρ^{st} y la temperatura T^{st} ; es decir

$$\epsilon_{\parallel}^{st} = \epsilon_{\parallel}(\rho^{st}, T^{st}), \quad \epsilon_{\perp}^{st} = \epsilon_{\perp}(\rho^{st}, T^{st}), \quad (\text{D.2})$$

que son las ecuaciones dieléctricas de estado del cristal líquido nemático. Es evidente que, a nivel local hay pequeñas fluctuaciones en estas cantidades, $\rho(\vec{r}, t) = \rho^{st} + \delta\rho(\vec{r}, t)$ y $T(\vec{r}, t) = T^{st} + \delta T(\vec{r}, t)$. Por lo tanto, si asumimos la existencia de un equilibrio local y considerando que las fluctuaciones en las constantes dieléctricas son lo suficientemente pequeñas para que puedan expresarse como desarrollos rápidamente con-

vergentes en una serie de potencias de las fluctuaciones de la densidad y la temperatura, entonces a primer orden en $\delta\rho$ y δT , $\delta\epsilon_{\parallel}(\vec{r}, t) \equiv \epsilon_{\parallel}(\vec{r}, t) - \epsilon_{\parallel}(\rho^{st}, T^{st})$ y $\delta\epsilon_{\perp}(\vec{r}, t) \equiv \epsilon_{\perp}(\vec{r}, t) - \epsilon_{\perp}(\rho^{st}, T^{st})$ pueden escribirse en la forma

$$\delta\epsilon_{\perp}(\vec{r}, t) = \left(\frac{\partial\epsilon_{\perp}}{\partial T}\right)_{\rho}^{st} \delta T(\vec{r}, t) + \left(\frac{\partial\epsilon_{\perp}}{\partial\rho}\right)_{T}^{st} \delta\rho(\vec{r}, t) \quad (\text{D.3})$$

$$\delta\epsilon_{\parallel}(\vec{r}, t) = \left(\frac{\partial\epsilon_{\parallel}}{\partial T}\right)_{\rho}^{st} \delta T(\vec{r}, t) + \left(\frac{\partial\epsilon_{\parallel}}{\partial\rho}\right)_{T}^{st} \delta\rho(\vec{r}, t), \quad (\text{D.4})$$

o más explícitamente como

$$\begin{aligned} \delta\epsilon_{\perp}(\vec{r}, t) = & \left[\left(\frac{\partial\epsilon_{\perp}}{\partial T}\right)_{\rho}^{st} \left(\frac{\partial T}{\partial p}\right)_{s}^{st} + \left(\frac{\partial\epsilon_{\perp}}{\partial\rho}\right)_{T}^{st} \left(\frac{\partial\rho}{\partial p}\right)_{s}^{st} \right] \delta p(\vec{r}, t) \\ & + \left[\left(\frac{\partial\epsilon_{\perp}}{\partial T}\right)_{\rho}^{st} \left(\frac{\partial T}{\partial s}\right)_{p}^{st} + \left(\frac{\partial\epsilon_{\perp}}{\partial\rho}\right)_{T}^{st} \left(\frac{\partial\rho}{\partial s}\right)_{p}^{st} \right] \delta s(\vec{r}, t), \end{aligned} \quad (\text{D.5})$$

$$\begin{aligned} \delta\epsilon_{\parallel}(\vec{r}, t) = & \left[\left(\frac{\partial\epsilon_{\parallel}}{\partial T}\right)_{\rho}^{st} \left(\frac{\partial T}{\partial p}\right)_{s}^{st} + \left(\frac{\partial\epsilon_{\parallel}}{\partial\rho}\right)_{T}^{st} \left(\frac{\partial\rho}{\partial p}\right)_{s}^{st} \right] \delta p(\vec{r}, t) \\ & + \left[\left(\frac{\partial\epsilon_{\parallel}}{\partial T}\right)_{\rho}^{st} \left(\frac{\partial T}{\partial s}\right)_{p}^{st} + \left(\frac{\partial\epsilon_{\parallel}}{\partial\rho}\right)_{T}^{st} \left(\frac{\partial\rho}{\partial s}\right)_{p}^{st} \right] \delta s(\vec{r}, t), \end{aligned} \quad (\text{D.6})$$

en donde δT y $\delta\rho$ se han expresado en términos de las fluctuaciones de la presión δp y de la entropía específica δs por medio de las relaciones termodinámicas

$$\delta\rho(\vec{r}, t) = \left(\frac{\partial\rho}{\partial p}\right)_{s}^{st} \delta p(\vec{r}, t) + \left(\frac{\partial\rho}{\partial s}\right)_{p}^{st} \delta s(\vec{r}, t) \quad (\text{D.7})$$

$$\delta T(\vec{r}, t) = \left(\frac{\partial T}{\partial p}\right)_{s}^{st} \delta p(\vec{r}, t) + \left(\frac{\partial T}{\partial s}\right)_{p}^{st} \delta s(\vec{r}, t). \quad (\text{D.8})$$

Suponiendo que $\epsilon_{\perp} \simeq \epsilon_{\perp}(\rho^{st})$ y $\epsilon_{\parallel} \simeq \epsilon_{\parallel}(\rho^{st})$, esto es, si ambas cantidades son sólo una función muy débil de la temperatura [12], [61], $(\partial\epsilon_{\perp}/\partial T)_{\rho}^{st} \simeq 0$ y $(\partial\epsilon_{\parallel}/\partial T)_{\rho}^{st} \simeq 0$. En consecuencia, las ecuaciones (D.5) y (D.6) se simplifican como

$$\delta\epsilon_{\perp}(\vec{r}, t) = \left(\frac{\partial\epsilon_{\perp}}{\partial\rho}\right)_{T}^{st} \left[\left(\frac{\partial\rho}{\partial p}\right)_{s}^{st} \delta p(\vec{r}, t) + \left(\frac{\partial\rho}{\partial s}\right)_{p}^{st} \delta s(\vec{r}, t) \right], \quad (\text{D.9})$$

$$\delta\epsilon_{\parallel}(\vec{r}, t) = \left(\frac{\partial\epsilon_{\parallel}}{\partial\rho}\right)_{T}^{st} \left[\left(\frac{\partial\rho}{\partial p}\right)_{s}^{st} \delta p(\vec{r}, t) + \left(\frac{\partial\rho}{\partial s}\right)_{p}^{st} \delta s(\vec{r}, t) \right]. \quad (\text{D.10})$$

Además, si tenemos en cuenta que $(\partial\rho/\partial s)_{p}^{st} = -\rho_0\beta T_0/c_p = -\left(\frac{\gamma-1}{\gamma} \frac{T_0 k_T \rho_0^3}{c_p}\right)^{1/2}$ y $(\partial\rho/\partial p)_{s}^{st} = 1/c_s^2$; es decir, si los valores de estas cantidades, incluidos los de $(\partial\epsilon_{\perp}/\partial\rho)_{T}^{st}$ y $(\partial\epsilon_{\parallel}/\partial\rho)_{T}^{st}$, en el estado estacionario son los mismos que en el equilibrio termodinámico, la transformada de Fourier espacial de las ecuaciones (D.9) y (D.10), considerando que $\epsilon_a \equiv \epsilon_{\parallel} - \epsilon_{\perp}$, puede escribirse como

$$\delta\epsilon_{\perp}(\vec{r}, t) = \left(\frac{\partial\epsilon_{\perp}}{\partial\rho}\right)_{T} \left[\frac{1}{c_s^2} \delta p(\vec{r}, t) - \left(\frac{\gamma-1}{\gamma} \frac{T_0 k_T \rho_0^3}{c_p}\right)^{1/2} \delta s(\vec{r}, t) \right], \quad (\text{D.11})$$

$$\delta\epsilon_a(\vec{r}, t) = \left(\frac{\partial\epsilon_a}{\partial\rho}\right)_T \left[\frac{1}{c_s^2} \delta p(\vec{r}, t) - \left(\frac{\gamma-1}{\gamma} \frac{T_0 \kappa_T \rho_0^3}{c_p}\right)^{1/2} \delta s(\vec{r}, t) \right]. \quad (\text{D.12})$$

Por lo tanto, reemplazando las ecuaciones (D.11) y (D.12) en la ecuación (D.1), se llega a

$$\begin{aligned} \delta\epsilon_{if}(\vec{r}, t) &= \frac{1}{c_s^2} \left[(\hat{i} \cdot \hat{f}) \left(\frac{\partial\epsilon_{\perp}}{\partial\rho}\right)_T + i_0 f_0 \left(\frac{\partial\epsilon_a}{\partial\rho}\right)_T \right] \delta p(\vec{r}, t) + \epsilon_a(\vec{r}, t) \sum_{\alpha=1,2} (i_0 f_{\alpha} + f_0 i_{\alpha}) \delta n_{\alpha}(\vec{r}, t) \\ &\quad - \left(\frac{\gamma-1}{\gamma} \frac{T_0 \kappa_T \rho_0^3}{c_p}\right)^{1/2} \left[(\hat{i} \cdot \hat{f}) \left(\frac{\partial\epsilon_{\perp}}{\partial\rho}\right)_T + i_0 f_0 \left(\frac{\partial\epsilon_a}{\partial\rho}\right)_T \right] \delta s(\vec{r}, t), \end{aligned} \quad (\text{D.13})$$

donde las derivadas se encuentran experimentalmente a partir de la variación con la densidad de ϵ_{\perp} y ϵ_a en un cristal líquido nemático en equilibrio. La sustitución de la ecuación (D.13) en la ecuación (5.2) da el espectro

$$\begin{aligned} I_{if}^{\epsilon}(\vec{k}, \omega) &= \left(\frac{\gamma-1}{\gamma} \frac{T_0 \kappa_T \rho_0^3}{c_p}\right) \left[(\hat{i} \cdot \hat{f}) \left(\frac{\partial\epsilon_{\perp}}{\partial\rho}\right)_T + i_0 f_0 \left(\frac{\partial\epsilon_a}{\partial\rho}\right)_T \right]^2 S_{ss}(\vec{k}, \omega) \\ &\quad - \epsilon_a \left(\frac{\gamma-1}{\gamma} \frac{T_0 \kappa_T \rho_0^3}{c_p}\right)^{1/2} \left[(\hat{i} \cdot \hat{f}) \left(\frac{\partial\epsilon_{\perp}}{\partial\rho}\right)_T + i_0 f_0 \left(\frac{\partial\epsilon_a}{\partial\rho}\right)_T \right] \sum_{\beta=1,2} (i_0 f_{\beta} + f_0 i_{\beta}) S_{sn_{\beta}}(\vec{k}, \omega) \\ &\quad - \epsilon_a \left(\frac{\gamma-1}{\gamma} \frac{T_0 \kappa_T \rho_0^3}{c_p}\right)^{1/2} \left[(\hat{i} \cdot \hat{f}) \left(\frac{\partial\epsilon_{\perp}}{\partial\rho}\right)_T + i_0 f_0 \left(\frac{\partial\epsilon_a}{\partial\rho}\right)_T \right] \sum_{\alpha=1,2} (i_0 f_{\alpha} + f_0 i_{\alpha}) S_{n_{\alpha}s}(\vec{k}, \omega) \\ &\quad + \epsilon_a^2 \sum_{\alpha=1,2} (i_0 f_{\alpha} + f_0 i_{\alpha}) \sum_{\beta=1,2} (i_0 f_{\beta} + f_0 i_{\beta}) S_{n_{\alpha}n_{\beta}}(\vec{k}, \omega), \end{aligned} \quad (\text{D.14})$$

en donde $S_{ss}(\vec{k}, \omega)$, $S_{n_{\alpha}s}(\vec{k}, \omega)$, $S_{sn_{\beta}}(\vec{k}, \omega)$, $S_{n_{\alpha}n_{\beta}}(\vec{k}, \omega)$, son, respectivamente, las densidades espectrales de las funciones de correlación $\langle \delta s(\vec{k}, t) \delta s^*(\vec{k}, 0) \rangle$, $\langle \delta n_{\alpha}(\vec{k}, t) \delta s^*(\vec{k}, 0) \rangle$, $\langle \delta s(\vec{k}, t) \delta n_{\beta}^*(\vec{k}, 0) \rangle$ y $\langle \delta n_{\alpha}(\vec{k}, t) \delta n_{\beta}^*(\vec{k}, 0) \rangle$. Debido a que en el espectro de Rayleigh no se consideran las fluctuaciones en la presión δp , en (D.14) las densidades espectrales $S_{pp}(\vec{k}, \omega)$, $S_{ps}(\vec{k}, \omega)$, $S_{sp}(\vec{k}, \omega)$, $S_{n_{\alpha}p}(\vec{k}, \omega)$ y $S_{pn_{\beta}}(\vec{k}, \omega)$ se anulan. Debe tomarse en cuenta que $I_{if}^{\epsilon}(\vec{k}, \omega)$ es directamente proporcional al factor de estructura dinámico $S(\vec{k}, \omega)$, por lo que en lo sucesivo se identificará a la ecuación (D.14) con $S(\vec{k}, \omega)$.

D.1. Geometría de dispersión H - H

De acuerdo con la Figura 5.1, en este caso $\hat{i} = \hat{e}_1$ y $\hat{f} = \cos\theta\hat{e}_1 + \text{sen}\theta\hat{z}$; por lo tanto, $\hat{i} \cdot \hat{f} = \cos\theta$, $i_0 \equiv 0$, $f_0 \equiv \text{sen}\theta$, $i_1 \equiv 1$, $i_2 \equiv 0$, $f_1 \equiv \cos\theta$, $f_2 \equiv 0$. Así, si $\hat{e}_1 = \hat{y}$, $\hat{e}_2 = -\hat{x}$, donde \hat{x} , \hat{y} denotan los vectores unitarios a lo largo de los ejes x , y , respectivamente, entonces la ecuación (D.14) se simplifica como

$$\begin{aligned} S(\vec{k}, \omega) &= \cos^2\theta \left(\frac{\gamma-1}{\gamma} \frac{T_0 \kappa_T \rho_0^3}{c_p}\right) \left(\frac{\partial\epsilon_{\perp}}{\partial\rho}\right)_T^2 S_{ss}(\vec{k}, \omega) + \epsilon_a^2 \text{sen}^2\theta S_{n_y n_y}(\vec{k}, \omega) \\ &\quad - \epsilon_a \cos\theta \text{sen}\theta \left(\frac{\gamma-1}{\gamma} \frac{T_0 \kappa_T \rho_0^3}{c_p}\right)^{1/2} \left(\frac{\partial\epsilon_{\perp}}{\partial\rho}\right)_T S_{sn_y}(\vec{k}, \omega) \\ &\quad - \epsilon_a \cos\theta \text{sen}\theta \left(\frac{\gamma-1}{\gamma} \frac{T_0 \kappa_T \rho_0^3}{c_p}\right)^{1/2} \left(\frac{\partial\epsilon_{\perp}}{\partial\rho}\right)_T S_{n_y s}(\vec{k}, \omega), \end{aligned} \quad (\text{D.15})$$

Por otro lado, sabemos que δn_y puede escribirse en términos de δf_1 y δf_2 por medio de

$$\delta n_y(\vec{k}, \omega) = -\frac{i}{k^2} \left[k_y \delta f_1(\vec{k}, \omega) + k_x \delta f_2(\vec{k}, \omega) \right], \quad (\text{D.16})$$

que se obtiene a partir de la transformada de Fourier espacial y temporal de las ecuaciones (4.54) y (4.55) del Capítulo 4. Por lo tanto, a partir de (D.16) se puede demostrar que

$$S_{n_y n_y}(\vec{k}, \omega) = \frac{k_y^2}{k^4} S_{f_1 f_1}(\vec{k}, \omega) + \frac{k_y k_x}{k^4} S_{f_1 f_2}(\vec{k}, \omega) + \frac{k_x k_y}{k^4} S_{f_2 f_1}(\vec{k}, \omega) + \frac{k_x^2}{k^4} S_{f_2 f_2}(\vec{k}, \omega), \quad (\text{D.17})$$

$$S_{n_y s}(\vec{k}, \omega) = -\frac{ik_y}{k^2} S_{f_1 s}(\vec{k}, \omega) - \frac{ik_x}{k^2} S_{f_2 s}(\vec{k}, \omega), \quad (\text{D.18})$$

$$S_{s n_y}(\vec{k}, \omega) = \frac{ik_y}{k^2} S_{s f_1}(\vec{k}, \omega) + \frac{ik_x}{k^2} S_{s f_2}(\vec{k}, \omega), \quad (\text{D.19})$$

en donde $S_{f_i f_j}(\vec{k}, \omega)$, $S_{f_i s}(\vec{k}, \omega)$ y $S_{s f_j}(\vec{k}, \omega)$ son, respectivamente, las densidades espectrales de las funciones de correlación $\langle \delta f_i(\vec{k}, t) \delta f_j^*(\vec{k}, 0) \rangle$, $\langle \delta f_i(\vec{k}, t) \delta s^*(\vec{k}, 0) \rangle$ y $\langle \delta s(\vec{k}, t) \delta f_j^*(\vec{k}, 0) \rangle$, para $i, j = 1, 2$.

Por lo tanto, teniendo en cuenta en las ecuaciones (D.17)-(D.19) que, de acuerdo con la geometría mostrada en la Figura 5.1, $k_x = 0$ y que $\langle \delta f_2 \delta f_1^* \rangle = \langle \delta f_1 \delta f_2^* \rangle = 0$ y $\langle \delta f_2 \delta s^* \rangle = \langle \delta s \delta f_2^* \rangle = 0$, la ecuación (D.15) puede escribirse como

$$\begin{aligned} S(\vec{k}, \omega) &= \cos^2 \theta \left(\frac{\gamma - 1}{\gamma} \frac{T_0 \kappa_T \rho_0^3}{c_p} \right) \left(\frac{\partial \epsilon_{\perp}}{\partial \rho} \right)_T^2 S_{ss}(\vec{k}, \omega) + \epsilon_a^2 \text{sen}^2 \theta \frac{k_{\perp}^2}{k^4} S_{f_1 f_1}(\vec{k}, \omega) \\ &+ \epsilon_a \frac{ik_{\perp}}{k^2} \cos \theta \text{sen} \theta \left(\frac{\gamma - 1}{\gamma} \frac{T_0 \kappa_T \rho_0^3}{c_p} \right)^{1/2} \left(\frac{\partial \epsilon_{\perp}}{\partial \rho} \right)_T \left[S_{f_1 s}(\vec{k}, \omega) - S_{s f_1}(\vec{k}, \omega) \right]. \end{aligned} \quad (\text{D.20})$$

La sustitución de las ecuaciones (C.19), (C.28), (C.46) y (C.47) en la ecuación (D.20) da lugar a

$$\begin{aligned} S(\vec{k}, \omega) &= k_B T_0 \left[D_3(\vec{k}, \omega) \frac{2\lambda_3}{\omega^2 + \lambda_3^2} + D_4(\vec{k}, \omega) \frac{2\lambda_4}{\omega^2 + \lambda_4^2} \right. \\ &\left. + D_5(\vec{k}, \omega) \frac{2\lambda_5}{\omega^2 + \lambda_5^2} \right], \end{aligned} \quad (\text{D.21})$$

siendo

$$\begin{aligned} D_3(\vec{k}, \omega) &\equiv \rho_0^2 \kappa_T \cos^2 \theta \left(\frac{\gamma - 1}{\gamma} \right) \left(\frac{\partial \epsilon_{\perp}}{\partial \rho} \right)_T^2 C_{33}(\vec{k}) + \epsilon_a^2 \text{sen}^2 \theta \frac{k_{\perp}^2}{\rho_0 c_s^2 k^2} C_{35}(\vec{k}) \\ &+ \epsilon_a \frac{ik_{\perp}}{c_s k} \cos \theta \text{sen} \theta \left(\frac{\gamma - 1}{\gamma} k_T \rho_0 \right)^{1/2} \left(\frac{\partial \epsilon_{\perp}}{\partial \rho} \right)_T \left[C_{353}(\vec{k}, \omega) - C_{335}(\vec{k}, \omega) \right], \end{aligned} \quad (\text{D.22})$$

$$\begin{aligned} D_4(\vec{k}, \omega) &\equiv \rho_0^2 \kappa_T \cos^2 \theta \left(\frac{\gamma - 1}{\gamma} \right) \left(\frac{\partial \epsilon_{\perp}}{\partial \rho} \right)_T^2 C_{43}(\vec{k}) + \epsilon_a^2 \text{sen}^2 \theta \frac{k_{\perp}^2}{\rho_0 c_s^2 k^2} C_{45}(\vec{k}) \\ &+ \epsilon_a \frac{ik_{\perp}}{c_s k} \cos \theta \text{sen} \theta \left(\frac{\gamma - 1}{\gamma} k_T \rho_0 \right)^{1/2} \left(\frac{\partial \epsilon_{\perp}}{\partial \rho} \right)_T \left[C_{453}(\vec{k}, \omega) - C_{435}(\vec{k}, \omega) \right], \end{aligned} \quad (\text{D.23})$$

$$\begin{aligned} D_5(\vec{k}, \omega) &\equiv \rho_0^2 \kappa_T \cos^2 \theta \left(\frac{\gamma - 1}{\gamma} \right) \left(\frac{\partial \epsilon_{\perp}}{\partial \rho} \right)_T^2 C_{53}(\vec{k}) + \epsilon_a^2 \text{sen}^2 \theta \frac{k_{\perp}^2}{\rho_0 c_s^2 k^2} C_{55}(\vec{k}) \\ &+ \epsilon_a \frac{ik_{\perp}}{c_s k} \cos \theta \text{sen} \theta \left(\frac{\gamma - 1}{\gamma} k_T \rho_0 \right)^{1/2} \left(\frac{\partial \epsilon_{\perp}}{\partial \rho} \right)_T \left[C_{553}(\vec{k}, \omega) - C_{535}(\vec{k}, \omega) \right], \end{aligned} \quad (\text{D.24})$$

en donde $C_{33}(\vec{k})$, $C_{43}(\vec{k})$, $C_{53}(\vec{k})$, $C_{35}(\vec{k})$, $C_{45}(\vec{k})$ y $C_{55}(\vec{k})$, están dadas, respectivamente, por las expresiones (C.10), (C.11), (C.12), (C.25), (C.26) y (C.27). También necesitamos utilizar las diferencias

$C_{353}(\vec{k}, \omega) - C_{335}(\vec{k}, \omega)$, $C_{453}(\vec{k}, \omega) - C_{435}(\vec{k}, \omega)$ y $C_{553}(\vec{k}, \omega) - C_{535}(\vec{k}, \omega)$ dadas, respectivamente, por (C.43) a (C.45). La sustitución de estas cantidades $C_{i3}(\vec{k})$, $C_{i5}(\vec{k})$ y $C_{i53}(\vec{k}, \omega) - C_{i35}(\vec{k}, \omega)$ (con $i = 3, 4, 5$) en las relaciones (D.22) a (D.24), permite escribir a éstas explícitamente como

$$\begin{aligned}
D_3(\vec{k}, \omega) \equiv & -\rho_0^2 \kappa_T \cos^2 \theta \left(\frac{\gamma - 1}{\gamma} \right) \left(\frac{\partial \epsilon_{\perp}}{\partial \rho} \right)_T \frac{\bar{\lambda}_3 \left[D_T \left(-\sigma_3^2 + \frac{2\Omega^2 K_I}{\rho_0} + \bar{\lambda}_3^2 \right) - \frac{c_p \sigma_3 X^2 \hat{k}_{\perp}^2}{T_0} \right]}{(\bar{\lambda}_4^2 - \bar{\lambda}_3^2) (\bar{\lambda}_3^2 - \bar{\lambda}_5^2)} \\
& + 2\epsilon_a \omega \cos \theta \operatorname{sen} \theta \left(\frac{\gamma - 1}{\gamma} \frac{\kappa_T \rho_0 c_p}{T_0} \right)^{1/2} \left(\frac{\partial \epsilon_{\perp}}{\partial \rho} \right)_T \frac{\left(X \Omega D_T \sigma_3 + \alpha \chi_a \Omega^2 \sigma_3 - \frac{\alpha \chi_a \rho_0 \bar{\lambda}_3^2}{\gamma_1} + \frac{\alpha \chi_a \rho_0 \sigma_3^2}{\gamma_1} \right) \hat{k}_{\perp}^3}{\bar{\lambda}_3 (\bar{\lambda}_4^2 - \bar{\lambda}_3^2) (\bar{\lambda}_3^2 - \bar{\lambda}_5^2)} \frac{1}{k^5} \\
& - \frac{\epsilon_a^2}{\rho_0} \operatorname{sen}^2 \theta \left[\frac{\left(\Omega^2 D_T^2 \sigma_3 - \frac{\rho_0 \sigma_3^2 \bar{\lambda}_3^2}{\gamma_1} - \Omega^2 \sigma_3 \bar{\lambda}_3^2 + \frac{\rho_0 \bar{\lambda}_3^4}{\gamma_1} \right) \hat{k}_{\perp}^4}{\bar{\lambda}_3 (\bar{\lambda}_4^2 - \bar{\lambda}_3^2) (\bar{\lambda}_3^2 - \bar{\lambda}_5^2)} \right. \\
& \left. + \frac{\left((\gamma - 1) \frac{g^2 \Omega^2 D_T}{c_s^2} + \frac{2gX\beta D_T \rho_0 \sigma_3}{\gamma_1} + \frac{2gX\beta \rho_0 \bar{\lambda}_3^2}{\gamma_1} \right) \hat{k}_{\perp}^6}{\bar{\lambda}_3 (\bar{\lambda}_4^2 - \bar{\lambda}_3^2) (\bar{\lambda}_3^2 - \bar{\lambda}_5^2)} \right], \tag{D.25}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
D_4(\vec{k}, \omega) \equiv & \rho_0^2 \kappa_T \cos^2 \theta \left(\frac{\gamma - 1}{\gamma} \right) \left(\frac{\partial \epsilon_{\perp}}{\partial \rho} \right)_T \frac{\bar{\lambda}_4 \left[D_T \left(-\sigma_3^2 + \frac{2\Omega^2 K_I}{\rho_0} + \bar{\lambda}_4^2 \right) - \frac{c_p \sigma_3 X^2 \hat{k}_{\perp}^2}{T_0} \right]}{(\bar{\lambda}_4^2 - \bar{\lambda}_3^2) (\bar{\lambda}_4^2 - \bar{\lambda}_5^2)} \\
& + 2\epsilon_a \omega \cos \theta \operatorname{sen} \theta \left(\frac{\gamma - 1}{\gamma} \frac{\kappa_T \rho_0 c_p}{T_0} \right)^{1/2} \left(\frac{\partial \epsilon_{\perp}}{\partial \rho} \right)_T \frac{\left(-X \Omega D_T \sigma_3 - \alpha \chi_a \Omega^2 \sigma_3 + \frac{\alpha \chi_a \rho_0 \bar{\lambda}_4^2}{\gamma_1} - \frac{\alpha \chi_a \rho_0 \sigma_3^2}{\gamma_1} \right) \hat{k}_{\perp}^3}{\bar{\lambda}_4 (\bar{\lambda}_4^2 - \bar{\lambda}_3^2) (\bar{\lambda}_4^2 - \bar{\lambda}_5^2)} \frac{1}{k^5} \\
& - \frac{\epsilon_a^2}{\rho_0} \operatorname{sen}^2 \theta \left[\frac{\left(-\Omega^2 D_T^2 \sigma_3 + \frac{\rho_0 \sigma_3^2 \bar{\lambda}_4^2}{\gamma_1} + \Omega^2 \sigma_3 \bar{\lambda}_4^2 - \frac{\rho_0 \bar{\lambda}_4^4}{\gamma_1} \right) \hat{k}_{\perp}^4}{\bar{\lambda}_4 (\bar{\lambda}_4^2 - \bar{\lambda}_3^2) (\bar{\lambda}_4^2 - \bar{\lambda}_5^2)} \right. \\
& \left. + \frac{\left(-(\gamma - 1) \frac{g^2 \Omega^2 D_T}{c_s^2} - \frac{2gX\beta D_T \rho_0 \sigma_3}{\gamma_1} - \frac{2gX\beta \rho_0 \bar{\lambda}_4^2}{\gamma_1} \right) \hat{k}_{\perp}^6}{\bar{\lambda}_4 (\bar{\lambda}_4^2 - \bar{\lambda}_3^2) (\bar{\lambda}_4^2 - \bar{\lambda}_5^2)} \right], \tag{D.26}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
D_5(\vec{k}, \omega) \equiv & \rho_0^2 \kappa_T \cos^2 \theta \left(\frac{\gamma - 1}{\gamma} \right) \left(\frac{\partial \epsilon_{\perp}}{\partial \rho} \right)_T \frac{D_T \left(\frac{2\Omega^2 K_I^2 \sigma_3}{\gamma_1 \rho_0} + \frac{\Omega^4 K_I^2}{\rho_0^2} - \sigma_3^2 \bar{\lambda}_5^2 \right) + \frac{c_p \sigma_3 (\alpha^2 \lambda_a^2 \Omega^2 + \alpha^2 \chi_a^2 \frac{\sigma_3 \rho_0}{\gamma_1} - X^2 \bar{\lambda}_5^2)}{T_0}}{\bar{\lambda}_5 (\bar{\lambda}_3^2 - \bar{\lambda}_5^2) (\bar{\lambda}_4^2 - \bar{\lambda}_5^2)} \frac{\hat{k}_{\perp}^2}{k^4} \\
& - 2\epsilon_a \omega \cos \theta \operatorname{sen} \theta \left(\frac{\gamma - 1}{\gamma} \frac{\kappa_T \rho_0 c_p}{T_0} \right)^{1/2} \left(\frac{\partial \epsilon_{\perp}}{\partial \rho} \right)_T \frac{\left(X \Omega D_T \sigma_3 + \alpha \chi_a \Omega^2 \sigma_3 + \frac{\alpha \chi_a \rho_0 \sigma_3^2}{\gamma_1} \right) \hat{k}_{\perp}^3}{\bar{\lambda}_5 (\bar{\lambda}_3^2 - \bar{\lambda}_5^2) (\bar{\lambda}_4^2 - \bar{\lambda}_5^2)} \frac{1}{k^5} \\
& + \frac{\epsilon_a^2}{\rho_0} \operatorname{sen}^2 \theta \left[\frac{\left(\frac{D_T^2 \rho_0 \sigma_3^2}{\gamma_1} + \Omega^2 D_T^2 \sigma_3 - \frac{\rho_0 \sigma_3^2 \bar{\lambda}_5^2}{\gamma_1} - \Omega^2 \sigma_3 \bar{\lambda}_5^2 \right) \hat{k}_{\perp}^4}{\bar{\lambda}_5 (\bar{\lambda}_3^2 - \bar{\lambda}_5^2) (\bar{\lambda}_3^2 - \bar{\lambda}_5^2)} \right. \\
& \left. + \frac{\left(\frac{g^2 \gamma \Omega^2 D_T}{c_s^2} - \frac{g^2 \Omega^2 D_T}{c_s^2} + \frac{2gX\beta D_T \rho_0 \sigma_3}{\gamma_1} \right) \hat{k}_{\perp}^6}{\bar{\lambda}_5 (\bar{\lambda}_3^2 - \bar{\lambda}_5^2) (\bar{\lambda}_3^2 - \bar{\lambda}_5^2)} \right], \tag{D.27}
\end{aligned}$$

En la deducción de los coeficientes (D.25) a (D.27) utilizamos la relación termodinámica $\beta^2 \equiv (\gamma - 1) c_p T_0^{-1} c_s^{-2}$.

En el caso en que se consideren ángulos de dispersión muy pequeños, es decir, $\theta \lesssim 1$, entonces $\cos \theta \simeq 1$, $\sin \theta \simeq 0$, y $D_3(\vec{k}, \omega)$, $D_4(\vec{k}, \omega)$ y $D_5(\vec{k}, \omega)$ se reducen considerablemente como

$$D_3(\vec{k}, \omega) \equiv -\rho_0^2 \kappa_T \left(\frac{\gamma-1}{\gamma} \right) \left(\frac{\partial \epsilon_{\perp}}{\partial \rho} \right)_T \frac{\bar{\lambda}_3 \left[D_T \left(-\sigma_3^2 + \frac{2\Omega^2 K_I}{\rho_0} + \bar{\lambda}_3^2 \right) - \frac{c_p \sigma_3 X^2 \bar{k}_4^2}{T_0 k^4} \right]}{\left(\bar{\lambda}_4^2 - \bar{\lambda}_3^2 \right) \left(\bar{\lambda}_3^2 - \bar{\lambda}_5^2 \right)}, \quad (\text{D.28})$$

$$D_4(\vec{k}, \omega) \equiv \rho_0^2 \kappa_T \left(\frac{\gamma-1}{\gamma} \right) \left(\frac{\partial \epsilon_{\perp}}{\partial \rho} \right)_T \frac{\bar{\lambda}_4 \left[D_T \left(-\sigma_3^2 + \frac{2\Omega^2 K_I}{\rho_0} + \bar{\lambda}_4^2 \right) - \frac{c_p \sigma_3 X^2 \bar{k}_4^2}{T_0 k^4} \right]}{\left(\bar{\lambda}_4^2 - \bar{\lambda}_3^2 \right) \left(\bar{\lambda}_4^2 - \bar{\lambda}_5^2 \right)}, \quad (\text{D.29})$$

$$D_5(\vec{k}, \omega) \equiv \rho_0^2 \kappa_T \left(\frac{\gamma-1}{\gamma} \right) \left(\frac{\partial \epsilon_{\perp}}{\partial \rho} \right)_T \left[\frac{D_T \left(\frac{2\Omega^2 K_I^2 \sigma_3}{\gamma_1 \rho_0} + \frac{\Omega^4 K_I^2}{\rho_0^2} - \sigma_3^2 \bar{\lambda}_5^2 \right)}{\bar{\lambda}_5 \left(\bar{\lambda}_3^2 - \bar{\lambda}_5^2 \right) \left(\bar{\lambda}_4^2 - \bar{\lambda}_5^2 \right)} + \frac{\frac{c_p \sigma_3}{T_0} \left(\alpha^2 \chi_a^2 \Omega^2 + \alpha^2 \chi_a^2 \frac{\sigma_3 \rho_0}{\gamma_1} - X^2 \bar{\lambda}_5^2 \right) \frac{\bar{k}_4^2}{k^4}}{\bar{\lambda}_5 \left(\bar{\lambda}_3^2 - \bar{\lambda}_5^2 \right) \left(\bar{\lambda}_4^2 - \bar{\lambda}_5^2 \right)} \right]. \quad (\text{D.30})$$

Por último, cabe señalar que si se tiene en cuenta que $\tilde{S}(\vec{k}, \tilde{\omega}) \equiv S(\vec{k}, \tilde{\omega})/S(\vec{k}, 0)$, a partir de la relación (D.21) se sigue que el factor de estructura dinámico normalizado está dado como

$$\begin{aligned} \tilde{S}(\vec{k}, \tilde{\omega}) &= D_3(\vec{k}, \tilde{\omega}) \frac{2\tilde{\lambda}_3}{\tilde{\omega}^2 + \tilde{\lambda}_3} + D_4(\vec{k}, \tilde{\omega}) \frac{2\tilde{\lambda}_4}{\tilde{\omega}^2 + \tilde{\lambda}_4} \\ &\quad + D_5(\vec{k}, \tilde{\omega}) \frac{2\tilde{\lambda}_5}{\tilde{\omega}^2 + \tilde{\lambda}_5}, \end{aligned} \quad (\text{D.31})$$

en donde $\tilde{\lambda}_3 \equiv \lambda_3/\chi_{\perp} k^2$, $\tilde{\lambda}_4 \equiv \lambda_4/\chi_{\perp} k^2$ y $\tilde{\lambda}_5 \equiv \lambda_5/\chi_{\perp} k^2$. En la deducción de la ecuación (D.31) los coeficientes $D_3(\vec{k}, \tilde{\omega})$, $D_4(\vec{k}, \tilde{\omega})$ y $D_5(\vec{k}, \tilde{\omega})$ son idénticos a los definidos por las expresiones generales (D.25) a (D.27), excepto que en ellos debe ser reemplazado ω por $\chi_{\perp} k^2 \tilde{\omega}$.

D.1.1. Valores de $R(\vec{k})/R_c$

La forma del factor de estructura dinámico dada por la ecuación (D.21) dependerá de la naturaleza de las tasas de decaimiento visco-calóricas λ_3 and λ_4 , ya que estas cantidades podrían ser difusivas o propagativas dependiendo de los valores que alcance la relación $R(\vec{k})/R_c$.

Así, cuando $R(\vec{k})/R_c < R_0(\vec{k})$, las tasas de decaimiento visco-calóricas $\lambda_{3,4}$ dadas por la ecuación (5.7) son complejas conjugadas, y la tasa de decaimiento λ_5 es real. En este caso resulta conveniente reescribir a los dos primeras como

$$\lambda_3(\vec{k}) = \Omega_0(\vec{k}) + i\Lambda_0(\vec{k}), \quad (\text{D.32})$$

$$\lambda_4(\vec{k}) = \Omega_0(\vec{k}) - i\Lambda_0(\vec{k}), \quad (\text{D.33})$$

en donde

$$\Omega_0(\vec{k}) \equiv \frac{1}{2} \left(D_T k^2 + \sigma_3 k^2 - \frac{\Omega^2 K_I k^4}{\rho_0 \sigma_3 k^2} \right) \quad (\text{D.34})$$

y

$$\Lambda_0(\vec{k}) \equiv \frac{1}{2} \sqrt{4D_T k^2 \sigma_3 k^2 \left(1 - \frac{R}{R_c}\right) - \left(D_T k^2 + \sigma_3 k^2 - \frac{\Omega^2 K_I k^4}{\rho_0 \sigma_3 k^2}\right)^2}. \quad (\text{D.35})$$

Por lo tanto, se puede demostrar que la forma analítica del factor de estructura dinámico $S(\vec{k}, \omega)$ determinado por (D.21), bajo la suposición de ángulos de dispersión muy pequeños ($\theta \lesssim 1$), queda escrita en términos de $\Omega_0(\vec{k})$ y $\Lambda_0(\vec{k})$ como

$$S(\vec{k}, \omega) = k_B T_0 \rho_0^2 \kappa_T \left(\frac{\gamma-1}{\gamma}\right) \left(\frac{\partial \epsilon_{\perp}}{\partial \rho}\right)_T \left[\frac{2F_1 \Omega_0}{(\omega + \Lambda_0)^2 + \Omega_0^2} + \frac{2G_1 \Omega_0}{(\omega - \Lambda_0)^2 + \Omega_0^2} + \frac{2H_1 \lambda_5}{\omega^2 + \lambda_5^2} \right. \\ \left. + \frac{2F_2 \Omega_0 \omega}{(\omega + \Lambda_0)^2 + \Omega_0^2} + \frac{2G_2 \Omega_0 \omega}{(\omega - \Lambda_0)^2 + \Omega_0^2} \right], \quad (\text{D.36})$$

en donde

$$F_1 \equiv \frac{\{D_T T_0 [\rho_0 (k^4 \sigma_3^2 - \lambda_5^2) - 2k^4 \Omega^2 K_I] k^2 + X^2 c_p k_{\perp}^2 \rho_0 \sigma_3\} (\Lambda_0^2 + \Omega_0^2)}{2T_0 \rho_0 \Omega_0 [\Lambda_0^2 + (\lambda_5 - \Omega_0)^2] [\Lambda_0^2 + (\lambda_5 + \Omega_0)^2]}, \quad (\text{D.37})$$

$$F_2 \equiv -\frac{D_T T_0 \{2\Omega^2 K_I (-\lambda_5^2 + \Lambda_0^2 + \Omega_0^2) k^4 + \rho_0 [(\sigma_3^2 k^4 + 3\Lambda_0^2 - \Omega_0^2) \lambda_5^2 + (\Lambda_0^2 + \Omega_0^2) (-\sigma_3^2 k^4 + \Lambda_0^2 + \Omega_0^2)]\} k^2}{4T_0 \Lambda_0 \rho_0 \Omega_0 [\lambda_5^4 + 2(\Lambda_0^2 - \Omega_0^2) \lambda_5^2 + (\Lambda_0^2 + \Omega_0^2)^2]} \\ - \frac{X^2 c_p k_{\perp}^2 \rho_0 \sigma_3 (\lambda_5^2 - \Lambda_0^2 - \Omega_0^2)}{4T_0 \Lambda_0 \rho_0 \Omega_0 [\lambda_5^4 + 2(\Lambda_0^2 - \Omega_0^2) \lambda_5^2 + (\Lambda_0^2 + \Omega_0^2)^2]}, \quad (\text{D.38})$$

$$G_1 \equiv \frac{\{D_T T_0 [\rho_0 (k^4 \sigma_3^2 - \lambda_5^2) - 2k^4 \Omega^2 K_I] k^2 + X^2 c_p k_{\perp}^2 \rho_0 \sigma_3\} (\Lambda_0^2 + \Omega_0^2)}{2T_0 \rho_0 \Omega_0 [\Lambda_0^2 + (\lambda_5 - \Omega_0)^2] [\Lambda_0^2 + (\lambda_5 + \Omega_0)^2]}, \quad (\text{D.39})$$

$$G_2 \equiv \frac{D_T T_0 \{2\Omega^2 K_I (-\lambda_5^2 + \Lambda_0^2 + \Omega_0^2) k^4 + \rho_0 [(\sigma_3^2 k^4 + 3\Lambda_0^2 - \Omega_0^2) \lambda_5^2 + (\Lambda_0^2 + \Omega_0^2) (-\sigma_3^2 k^4 + \Lambda_0^2 + \Omega_0^2)]\} k^2}{4T_0 \Lambda_0 \rho_0 \Omega_0 [\lambda_5^4 + 2(\Lambda_0^2 - \Omega_0^2) \lambda_5^2 + (\Lambda_0^2 + \Omega_0^2)^2]} \\ + \frac{X^2 c_p k_{\perp}^2 \rho_0 \sigma_3 (\lambda_5^2 - \Lambda_0^2 - \Omega_0^2)}{4T_0 \Lambda_0 \Omega_0 [\lambda_5^4 + 2(\Lambda_0^2 - \Omega_0^2) \lambda_5^2 + (\Lambda_0^2 + \Omega_0^2)^2]}, \quad (\text{D.40})$$

$$H_1 \equiv \frac{D_T T_0 [k^4 \Omega^2 K_I^2 (\gamma_1 \Omega^2 + 2\rho_0 \sigma_3) - \gamma_1 \lambda_5^2 \rho_0^2 \sigma_3^2] k^6 + c_p k_{\perp}^2 \rho_0^2 \sigma_3 [k^4 \alpha^2 (\gamma_1 \Omega^2 + \rho_0 \sigma_3) \chi_a^2 - X^2 \gamma_1 \lambda_5^2]}{\lambda_5 T_0 \gamma_1 \rho_0^2 [\lambda_5^4 + 2(\Lambda_0^2 - \Omega_0^2) \lambda_5^2 + (\Lambda_0^2 + \Omega_0^2)^2]}. \quad (\text{D.41})$$

Obsérvese que $F_1 = G_1$ y $F_2 = -G_2$.

Por otra parte, cuando $R_0(\vec{k}) < R(\vec{k})/R_c < 1$, las tasas de decaimiento visco-calóricas $\lambda_{3,4}$ dadas por la ecuación (5.7) son reales, al igual que λ_5 . En este caso, el factor de estructura dinámico $S(\vec{k}, \omega)$ tiene la misma estructura que en la ecuación (D.21), cuyos coeficientes $D_3(\vec{k}, \omega)$, $D_4(\vec{k}, \omega)$ y $D_5(\vec{k}, \omega)$, en el supuesto de ángulos de dispersión muy pequeños ($\theta \lesssim 1$), están dados por las expresiones (D.28) a (D.30).

D.2. Geometría de dispersión V-H

Si $\hat{i} = -\hat{e}_2$ y $\hat{f} = \cos \theta \hat{e}_1 + \sin \theta \hat{z}$, entonces $\hat{i} \cdot \hat{f} = 0$, $i_0 \equiv 0$, $f_0 \equiv \sin \theta$, $i_1 \equiv 0$, $f_1 \equiv \cos \theta$, $i_2 \equiv -1$, $f_2 \equiv 0$. Así, si $\hat{e}_1 = \hat{y}$, $\hat{e}_2 = -\hat{x}$, entonces la ecuación (D.14) se simplifica como

$$I_{if}^{\epsilon}(\vec{k}, \omega) = \epsilon_a^2 \sin^2 \theta S_{n_x n_x}(\vec{k}, \omega). \quad (\text{D.42})$$

Por otro lado, sabemos que δn_x puede escribirse en términos de δf_1 y δf_2 como

$$\delta n_x(\vec{k}, \omega) = -\frac{i}{k^2} \left[k_x \delta f_1(\vec{k}, \omega) - k_y \delta f_2(\vec{k}, \omega) \right], \quad (\text{D.43})$$

que también se obtiene a partir de la transformada de Fourier espacial y temporal de las ecuaciones (4.54) y (4.55) dadas en el Capítulo 4. Así, a partir de (D.16) se puede demostrar que

$$S_{n_x n_x}(\vec{k}, \omega) = \frac{k_x^2}{k^4} S_{f_1 f_1}(\vec{k}, \omega) - \frac{k_x k_y}{k^4} S_{f_1 f_2}(\vec{k}, \omega) - \frac{k_y k_x}{k^4} S_{f_2 f_1}(\vec{k}, \omega) + \frac{k_y^2}{k^4} S_{f_2 f_2}(\vec{k}, \omega). \quad (\text{D.44})$$

Teniendo en cuenta en la ecuación (D.44) que, de acuerdo con la geometría mostrada en la Figura 5.1, $k_x = 0$ y que δf_1 y δf_2 no están correlacionados, $\langle \delta f_2 \delta f_1^* \rangle = \langle \delta f_1 \delta f_2^* \rangle = 0$, la ecuación (D.42) se simplifica a

$$S(\vec{k}, \omega) = \epsilon_a^2 \text{sen}^2 \theta \frac{k_y^2}{k^4} S_{f_2 f_2}(\vec{k}, \omega). \quad (\text{D.45})$$

En la deducción de la ecuación (D.45) también fue identificado $I_{if}^\epsilon(\vec{k}, \omega)$ con $S(\vec{k}, \omega)$.

En este caso cabe señalar que, según la Subsección 4.2.4, la transformada de Fourier espacial de las fluctuaciones de δf_2 presentes en $S_{f_2 f_2}$ pertenecen al vector de variables transversales $\delta \vec{X}^T(\vec{k}, t)$ (definido por (4.68)) cuya dinámica está determinada por la matriz N^T (dada por (4.71)). La ausencia de α y g en esta matriz implica que la fuente de los efectos de no equilibrio no es el acoplamiento de modos, sino el ruido térmico correlacionado inhomogéneo. Por lo tanto, al calcular las correspondientes funciones de autocorrelación y correlación cruzada de z_6 y z_7 , se debe tener en cuenta la transformada de Fourier del perfil de temperatura (4.2) dado por la ecuación (A.19) con $\alpha \neq 0$.

Apéndice E

Parámetros materiales del nemático MBBA

Este apéndice incluye los valores de los parámetros materiales del cristal líquido nemático termótropo MBBA utilizados en los cálculos realizados en esta tesis. El MBBA se encuentra en la fase nemática en temperaturas que caen dentro de un intervalo de $20^{\circ}C$ a $47^{\circ}C$. Los parámetros materiales de esta sustancia se indican en la Tabla E.1.

Parámetros materiales	Valores	Parámetros materiales	Valores
λ	1.03	γ_1	$76.3 \times 10^{-2} g \text{ cm}^{-1} s^{-1}$
ρ_0	$1.029 g \text{ cm}^{-3}$	χ_{\parallel}	$1.368 \times 10^{-3} \text{ cm}^2 s^{-1}$
ν_1	$102 \times 10^{-2} g \text{ cm}^{-1} s^{-1}$	χ_{\perp}	$8.107 \times 10^{-4} \text{ cm}^2 s^{-1}$
ν_2	$41.6 \times 10^{-2} g \text{ cm}^{-1} s^{-1}$	c_p	$3.8 \times 10^7 \text{ erg } g^{-1} K^{-1}$
ν_3	$23.8 \times 10^{-2} g \text{ cm}^{-1} s^{-1}$	c_v	$1.96 \times 10^7 \text{ erg } g^{-1} K^{-1}$
ν_4	$120 \times 10^{-2} g \text{ cm}^{-1} s^{-1}$	c_s	$1.5 \times 10^5 \text{ cm } s^{-1}$
ν_5	$70 \times 10^{-2} g \text{ cm}^{-1} s^{-1}$	β	$9.26 \times 10^{-4} K^{-1}$
K_1	$5.5 \times 10^{-7} g \text{ cm } s^{-2}$	ϵ_{\parallel}	4.75
K_2	$2.2 \times 10^{-7} g \text{ cm } s^{-2}$	ϵ_{\perp}	5.16
K_3	$7.45 \times 10^{-7} g \text{ cm } s^{-2}$	n	1.6
κ_T	$4.32 \times 10^{-11} g^{-1} \text{ cm } s^2$		

Tabla E.1: Parámetros materiales del cristal líquido nemático MBBA

Bibliografía

- [1] J. P. Boon and S. Yip, *Molecular Hydrodynamics* (Dover, New York, 1991).
- [2] L. P. Kadanoff and P. C. Martin, *Ann. Phys.* **24**, 419 (1963).
- [3] H. Pleiner and H. R. Brand, *Hydrodynamics and Electrohydrodynamics of Nematics, in Pattern Formation in Liquid Crystals*, A. Buka and L. Kramers, editors (Springer, Berlin, 1996).
- [4] M. J. Stephen, *Phys. Rev. A* **2**, 1558 (1970).
- [5] L. D. Landau and E. Lifshitz, *Fluid Dynamics* (Pergamon, New York, 1959).
- [6] R. F. Fox and G. E. Uhlenbeck, *Phys. Fluids* **13**, 1893 (1970); *ibid.* **13**, 2881 (1970).
- [7] R. Zwanzig, *Ann. Rev. Phys. Chem.* **16**, 67 (1965).
- [8] D. A. McQuarrie, *Statistical Mechanics* (Harper and Row, New York, 1976).
- [9] L. Onsager and S. Machlup, *Phys. Rev.* **91**, 1505 (1953).
- [10] R. D. Mountain, *Rev. Mod. Phys.* **38**, 205 (1966).
- [11] P. A. Fleury and J. P. Boon, *Adv. Chem. Phys.* **24**, 1 (1973).
- [12] B. J. Berne and R. Pecora, *Dynamic Light Scattering* (J. Wiley, New York, 1976).
- [13] R. A. Fleury and J. P. Boon, *Phys. Rev.* **186**, 244 (1969).
- [14] J. G. Dil, *Rep. Prog. Phys.* **45**, 285 (1982).
- [15] L. Brillouin, *Ann. Phys.* **17**, 88 (1922).
- [16] L. Brillouin, *Comptes Rendus* **158**, 1331 (1914).
- [17] J. Goldstone, *Nuovo Cimento* **19**, 154 (1961).
- [18] A. M. S. Tremblay, E. D. Siggia and M. R. Arai, *Phys. Lett.* **76A**, 57 (1980).
- [19] A. M. S. Tremblay, *in Recent Developments in Nonequilibrium Thermodynamics*, J. Casas-Vázquez, D. Jou and G. Lebon, Eds. (Lecture Notes in Physics No. 199, Springer Berlin, 1984).

- [20] T. Kirkpatrick and E. G. D. Cohen, Phys. Lett. **78A**, 350 (1980).
- [21] E. G. D. Cohen, KINAM **3A**, 39 (1981).
- [22] I. Procaccia, D. Ronis, M. A. Collins, J. Ross and I. Oppenheim, Phys Rev. A **19**, 1290 (1979); I. Procaccia, D. Ronis and I. Oppenheim, Phys. Rev. A **20**, 2533 (1979).
- [23] D. Ronis, I. Procaccia and I. Oppenheim, Phys Rev. A **19**, 1324 (1979).
- [24] G. Van der Zwan and P. Mazur, Phys. Lett. **75A**, 370 (1980).
- [25] G. Van der Zwan, D. Bedeaux and P. Mazur, Physica A **107**, 491 (1981).
- [26] D. Ronis and S. Putterman, Phys. Rev. **22**, 773 (1980).
- [27] T. R. Kirkpatrick, E. G. D. Cohen and J. R. Dorfman, Phys. Rev. Lett. **44**, 472 (1980).
- [28] J. Keizer, Phys. Fluids **21**, 198 (1978).
- [29] D. Ronis, I. Procaccia and J. Machta, Phys. Rev. A **22**, 714 (1980).
- [30] R. Schmitz and E.G. D. Cohen, J. Stat. Phys. **39** 285 (1985).
- [31] D. Beysens, Y. Garrabos and G. Zalczer, Phys. Rev. Lett. **45**, 403 (1980).
- [32] B. M. Law and J. V. Sengers, J. Stat. Phys. **57**, 531 (1989).
- [33] P. N. Segrè, R. W. Gammon, J. V. Sengers and B. M. Law, Phys. Rev. A **45** (2), 714 (1992).
- [34] S. M. Rytov, Sov. Phys. JETP **6**, 130 (1958); Sov. Phys. JETP **6**, 401 (1958); Sov. Phys. JETP **31**, 1163 (1970).
- [35] M. López de Haro, J. A. del Río and F. Vázquez, Rev. Mex. Fís. **48**, Sup. 1, 230 (2002).
- [36] J. Bonet Avalos, J. M. Rubí, R. F. Rodríguez, and A. Pérez Madrid, Phys. Rev. A **41**, 1923 (1990).
- [37] R. Schmitz, Physica A **195**, 25 (1994).
- [38] C. H. Wang, Mol. Phys. **41**, 541 (1980); C. H. Wang and E. W. Fischer J. Chem. Phys. **82**, 632 (1985); C. H. Wang, Mol. Phys. **58**, 497 (1986); C. H. Wang, X. R. Zhu and J. C. Shen, Mol. Phys. **62**, 749 (1987).
- [39] R. F. Rodríguez, L. S. García-Colín and L. F. del Castillo, Chem. Phys. **86**, 4208 (1987).
- [40] M. López de Haro, R. F. Rodríguez and L. S. García-Colín, Chem. Phys. **86**, 4216 (1987).
- [41] R. F. Rodríguez, O. Manero, and M. Aguado, Phys. Rev. B **38**, 4827 (1988).
- [42] F. Vázquez and M. López de Haro, J. Non-Equilib. Thermodyn. **26**, 279 (2001).

- [43] R. F. Rodríguez, *Acta Physica Hungarica* **66** (1-4), 233 (1989).
- [44] F. M. Leslie, *Quart. J. Mech. Appl. Math.* **19**, 357 (1966).
- [45] J. L. Ericksen, *Trans. Soc. Rheol.* **5**, 23 (1961).
- [46] P. G. de Gennes and J. Prost, *The Physics of Liquid Crystals* (Clarendon Press, Oxford, 1998).
- [47] S. Chandrasekhar, *Liquid Crystals*, 2nd edition (Cambridge, New York, 1992).
- [48] J. D. Gaton, M. San Miguel and P. S. Shani, *Phase Transitions and Critical Phenomena*, C. Domb and J. L. Lebowitz, editors, Vol 8 (Academic, New York, 1983).
- [49] M. San Miguel and F. Sagués, *Phys. Rev.* **36**, 1883 (1987).
- [50] S. R. de Groot and P. Mazur, *Non-Equilibrium Thermodynamics* (Dover, New York, 1984).
- [51] P. Ortega, *Descripción Termo-Hidrodinámica de Fenómenos de Relajación en Cristales Líquidos Nemáticos* (Tesis Doctoral FQ-UNAM, México, 1995).
- [52] E. I. Kats and V. V. Lebedev, *Fluctuational Effects in the Dynamics of Liquid Crystals* (Springer-Verlag, Berlin, 1994).
- [53] R. F. Fox, *Physics Reports* **48**, 179 (1978).
- [54] P. C. Martin, O. Parodi and P. S. Pershan, *Phys. Rev. A* **6**, 2401 (1972).
- [55] D. Forster, *Hydrodynamic Fluctuations, Broken Symmetry and Correlation Functions* (Benjamin, Reading, 1975).
- [56] H. Pleiner and H. R. Brand, *Phys. Rev. A* **27**, 1117 (1983).
- [57] H. Pleiner and H. R. Brand, *J. Phy. Lett. (Paris)* **44**, L23 (1983).
- [58] Groupe d'étude des cristaux liquides (Orsay), *J. Chem. Phys.* **51**, 816 (1969).
- [59] L. D. Landau and E. Lifshitz, *Theory of Elasticity*, 3rd edition (Pergamon, New York, 1964).
- [60] J. F. Camacho, H. Híjar, R. F. Rodríguez, *Physica A* **348**, 252 (2005).
- [61] G. B. Benedek, *Thermal Fluctuations and the Scattering of Light, Statistical Physics, Phase Transitions and Superfluidity*, Brandeis University Summer Lectures, Vol. 2 (Gordon and Breach, New York, 1966).
- [62] P. N. Segré, R. Schmitz and J. V. Sengers, *Physica A*, **195**, 31 (1993).
- [63] H. N. W. Lekkerkerker and J. P. Boon, *Phys. Rev. A* **10**, 1355 (1974).
- [64] J. Ortíz de Zárate and J. V. Sengers, *Hydrodynamic Fluctuations in fluids and Fluid Mixtures* (Elsevier, Amsterdam, 2006).

- [65] N. G. Migranov, A. V. Verevochnikov and A. N. Chuvyrov, *Mol. Cryst. Liq. Cryst.* **319**, 31 (1998).
- [66] K. Miyakawa, *J. Phys. Soc. Jpn.* **39** (3), 628 (1975).
- [67] J. F. Camacho and R. F. Rodríguez, arXiv:1604.08250, [cond-mat, soft] 27 Apr 2016.
- [68] J. F. Camacho and R. F. Rodríguez, *Eur. Phys. J. B* **90**, 21 (2017).
- [69] J. F. Camacho and R. F. Rodríguez, *Eur. Phys. J. B* **90**, 22 (2017).
- [70] R. F. Rodríguez and J. F. Camacho in *Recent Developments in Mathematical and Experimental Physics*, Vol. B Statistical Physics and Beyond, A Macias, E. Díaz and F. Uribe, editors (Kluwer, New York, 2003).
- [71] R. F. Rodríguez and J. F. Camacho, *Rev. Mex. Fís.* **48** (S1), 144 (2002).
- [72] C. W. Oseen, *Trans. Faraday Soc.* **29**, 883 (1933).
- [73] H. Zöcher, *Phys. Z.* **28**, 790 (1927).
- [74] H. Zöcher, *Trans. Faraday Soc.* **29**, 945 (1933).
- [75] F. C. Frank, *Disc. Faraday Soc.* **25**, 19 (1958).
- [76] A. Anzelius, Uppsala Univ. Årsskr. Mat. Och Naturvet. (127), 1 (1931).
- [77] I. M. Khalatnikov, *Introduction to the Theory of Superfluidity* (Benjamin, New York, 1965).
- [78] N. N. Bogoljubov, *Phys. Abhandl. SU* **6**, 229 (1962).
- [79] D. Forster, T. C. Lubensky, P. C. Martin, J. Swift and P. S. Pershan, *Phys. Rev. Lett.* **26**, 1016 (1971).
- [80] P. Hohenberg and P. C. Martin, *Ann. Phys.* **34**, 291 (1965).
- [81] J. L. Ericksen, *Arch. Rational Mech. Anal.* **4**, 231 (1960).
- [82] F. M. Leslie, *Arch. Rational Mech. Anal.* **28**, 265 (1968).
- [83] H. W. Huang, *Phys. Rev. Lett.* **26**, 1525 (1971).
- [84] J. Jähanning and H. Schmidt, *Ann. Phys.* **71**, 129 (1971).
- [85] J. D. Lee and A. C. Eringen, *J. Chem. Phys.* **54**, 5027 (1971).
- [86] H. Kelker and R. Hatz, *Handbook of Liquid Crystals* (Verlag Chemie, West Germany, 1980).
- [87] H. F. Gleeson in *Handbook of Liquid Crystals*, D. Demus, J. Goodby, G. W. Gray, H. W. Spiess and V. Vill, editors (Wiley-VCH, Weinheim, 1998).
- [88] P. J. Collings *Liquid Crystals* (Princeton University Press, Princeton, 1990).

- [89] F. Reinitzer, *Monatsch Chem.* **9**, 421 (1888).
- [90] O. Lehmann, *Z. Physical. Chem.* **4**, 462 (1889).
- [91] B. Bahadur, editor, *Liquid Crystals: Applications and Uses, Vol. I* (World Scientific, Singapore, 1990).
- [92] G. W. Gray, editor, *Thermotropic Liquid Crystals*, (John Wiley and Sons, London, 1987).
- [93] I. C. Khoo, *Liquid Crystals: Physical Properties and Nonlinear Optical Phenomena* (J. Wiley, New York, 1995).
- [94] G. Friedel, *Ann. Physique* **18**, 273 (1922).
- [95] M. J. Stephen and J. P. Straley, *Revs. Mod. Phys.* **46** (4), 617 (1974).
- [96] A. Saupe, *Naturforsch* **20a**, 572 (1965).
- [97] P. G. de Gennes, *Mol. Cryst. Liq. Cryst.* **12**, 193 (1971).
- [98] W. Helfrich, *Mol. Crystals* **21**, 187 (1973).
- [99] R. B. Mayer, *Phys. Rev. Lett.* **22**, 918 (1969).
- [100] L. M. Blinov, *Electro-Optical and Magneto-Optical Properties of Liquid Crystals* (Wiley, New York, 1983).
- [101] L. García-Colín, *Introducción a la Termodinámica Clásica* (Trillas, México, 1986).
- [102] H. B. Callen, *Thermodynamics* (Wiley, New York, 1960).
- [103] C. W. Oseen, *Arkiv För Matematik, Astronomi Och Fysik*, **19A** (part 9), 1 (1925).
- [104] D. Forster, *Hydrodynamics of Ordered Systems* **84**, 505 (1974).
- [105] J. L. Ericksen, *Physics Fluids* **9**, 231 (1966).
- [106] J. L. Ericksen, *Arch. Rational Mech. Anal.* **19**, 357 (1966).
- [107] O. J. Parodi, *J. Phys. (Fr.)* **31**, 581 (1970).
- [108] W. H. de Jeu, *Physical Properties of Liquid Crystalline Materials* (Gordon and Breach, New York, 1980).
- [109] I. G. Currie, *Fundamental Mechanics of Fluids*, (Mc Graw Hill, New York, 1974).
- [110] N. G. Van Kampen, *Stochastic Processes in Physics and Chemistry*, 3rd edition (Elsevier, Amsterdam, 2007) .
- [111] G. Goertzel and N. Tralli, *Some Mathematical Methods of Physics*, (McGraw-Hill, New York, 1960).

- [112] A. J. McKane and F. Vázquez, Phys. Rev. E **64**, 046116 (2001).
- [113] A. Einstein, Ann. Phys. **33**, 1275 (1910).
- [114] J. T. Ho, in: *Liquid Crystals: Experimental Study of Physical Properties*, ed. by S. Kumar (Cambridge University Press, UK, 2001).
- [115] P. Chatelain, Acta Crystallogr. **1**, 315 (1948).
- [116] P. G. de Gennes, C. R. Acad. Sci. Paris **266**, 15 (1968).
- [117] A. Yu. Val'kov and V. P. Romanov, Zh. Eksp. Teor. Fiz. **90**, 737 (1986), [Sov. Phys. JETP **63** (4), 1028 (1986)].
- [118] E. Miraldi, L. Trossi, P. T. Valabrega and C. Oldano, Nuovo Cimento B **60**, 165 (1980).
- [119] M. Lax and D. F. Nelson, in: *Coherence and Quantum Optics* [Proc. Third Rochester Conf., Rochester, N. Y., 1972, ed. by L. Mandel and E. Wolf] (Plenum Press, New York, 1973).
- [120] J. R. Lalanne, B. Martin and B. Pouligny, Mol. Cryst. Liq. Cryst. **42**, 153 (1977).
- [121] G. Grinstein, D. H. Lee and S. Sachdev, Phys. Rev. Lett. **64**, 1927 (1990).
- [122] J. R. Dorfman, T. R. Kirkpatrick and J. V. Sengers, Annu. Rev. Phys. Chem. **45**, 213 (1994).
- [123] D. Beysens, Y. Garrabos and G. Zalczer, Phys. Rev. Lett. **45**, 403 (1980).
- [124] B. Law, M., P. N. Segrè, R. W. Gammon and J. V. Sengers, Phys. Rev. A **41** (2), 816 (1990).
- [125] H. Híjar and R. F. Rodríguez, Phys. Rev. E **68**, 051701 (2004).
- [126] H. Híjar and R. F. Rodríguez, Rev. Mex. Phys. **52** (5), 5 (2006).
- [127] H. Híjar and R. F. Rodríguez, arXiv:0611388v2, [cond-mat, soft] 28 Nov 2006.
- [128] J. Bonet-Avalos, J. M. Rubí, R. F. Rodríguez and A. Pérez-Madrid, Phys. Rev. A **41**, 1923 (1990).
- [129] J. Frenkel, *Kinetic Theory of Liquids* (Oxford University Press, London, 1946).
- [130] S. Chandrasekhar, *Hydrodynamic and Hydromagnetic Stability* (Clarendon, Oxford, 1961).
- [131] H. N. W. Lekkerkerker, D. Carle and W. G. Laidlaw, Le Journal de Physique **37**, 1061 (1976).
- [132] P. Pieranski, E. Dubois-Violette and E. Guyon, Phys. Rev. Lett. **30** (16), 736 (1973).
- [133] J. P. Boon, C. Allain and P. Lallemand, Phys. Rev Lett. **43**, 199 (1979).
- [134] R. F. Rodríguez and H. Híjar, Eur. Phys. J. B **50**, 105 (2006).
- [135] N. A. Clark and Y. Liao, J. Chem. Phys. **63** (10), 4133 (1975).

[136] D. Ronis, I. Procaccia and J. Machta, Phys. Rev. A **22**, 714 (1980).

[137] R. F. Fox and G. E. Uhlenbeck, Phys. Fluids **13**, 2881 (1970).

Lista de símbolos

Aquí se muestra una relación de los símbolos de las diversas cantidades utilizadas, de acuerdo con su orden de aparición, en todos los apartados de esta tesis. A la derecha de cada uno de ellos se señala su nombre, sus dimensiones entre corchetes (si se trata de una cantidad física) y la página en la que define por primera vez. Para indicar las dimensiones de cada cantidad, se han utilizado las unidades fundamentales de masa M , longitud L , temperatura T y tiempo t . Las ecuaciones para la densidad espectral y el factor de estructura dinámico de la luz dispersada, presentadas en el Capítulo 3, se basan en el sistema CGS. Dado que en este sistema no se tiene una dimensión adicional para las magnitudes electromagnéticas y además cuenta con varios subsistemas para nombrarlas, en el listado se ha optado por denotar con $\overline{\mathcal{E}}$ y $\overline{\mathcal{M}}$, respectivamente, a las cantidades que dimensionalmente son idénticas a los campos eléctrico y magnético. Si la cantidad considerada es arbitraria, su dimensión se denota como $[u]$; si resulta adimensional, se pone $[1]$.

Se han considerado cantidades que se encuentran tanto en el estado de equilibrio como de no equilibrio termodinámico. Las primeras se denotan, a menos que se especifique lo contrario, con un subíndice o superíndice 0 y en ocasiones con el superíndice eq ; mientras que para las segundas, se usan los superíndices st o neq .

Introducción

k	—	número de onda, $[L^{-1}]$, pág. 1
ω	—	frecuencia angular, $[t^{-1}]$, pág. 1
τ	—	tiempo de relajación de casi todos los grados de libertad, $[t]$, pág. 2
$S(\vec{k}, \omega)$	—	factor de estructura dinámico, $[L^3t]$, pág. 4
\vec{k}	—	vector de onda, $[L^{-1}]$, pág. 4
R/R_c	—	cociente de Rayleigh, $[1]$, pág. 9
R	—	número de Rayleigh, $[1]$, pág. 9
R_c	—	número de Rayleigh al inicio del umbral de convección, $[1]$, pág. 9

Capítulo 1

$O(3)$	—	grupo de simetría de rotación, pág. 15
$T(3)$	—	grupo de simetría de traslación, pág. 15

$T(2)$	—	grupo de simetría de traslación de cristales líquidos esmécticos, pág. 15
$T(1)$	—	grupo de simetría de traslación de cristales líquidos columnares, pág. 15
$D_{\infty h}$	—	grupo de simetría uniaxial para nemáticos, pág. 15
ν_j^i	—	componente j -ésima del vector unitario $\hat{\nu}$ de la i -ésima molécula de un cristal líquido nemático, pág. 15
$\bar{S}_{\alpha\beta}$	—	parámetro de orden tensorial, [1], pág. 15
N	—	número de moléculas de un volumen nemático pequeño, [1], pág. 16
\vec{r}	—	vector de posición, [L], pág. 16
$\delta_{\alpha\beta}$	—	delta de Kronecker, pág. 16
$\cos\theta_{\alpha'}$	—	ángulo sobre el eje molecular α' y el eje óptico, [1], pág. 16
$\langle \dots \rangle$	—	promedio, pág. 16
$\bar{\chi}$	—	susceptibilidad magnética volumétrica escalar, [1], pág. 16
\vec{M}	—	magnetización, $[\overline{\mathcal{M}}]$, pág. 16
\vec{H}	—	campo magnético, $[\overline{\mathcal{M}}]$, pág. 16
$\bar{Q}_{\alpha\beta}$	—	parámetro de orden tensorial simétrico, [1], pág. 16
$\bar{\chi}_{\alpha\beta}$	—	susceptibilidad magnética volumétrica tensorial, [1], pág. 16
\vec{n}, n_{α} o \hat{n}	—	campo director, [1], pág. 17
T	—	temperatura, [T], pág. 17
T_m y T_c	—	temperaturas de fusión de un sólido en nemático y aclaramiento de un nemático en líquido isotropo, [T], pág. 17
\bar{S}	—	parámetro de orden escalar, [1], pág. 18
\bar{Q}	—	parámetro de orden escalar anisótropo, [1], pág. 18
$\bar{\chi}_{\parallel}$ y $\bar{\chi}_{\perp}$	—	susceptibilidades magnéticas volumétricas paralela y perpendicular al eje de simetría, [1], pág. 18
\vec{D}	—	campo de desplazamiento eléctrico, $[\overline{\mathcal{E}}]$, pág. 19
\vec{E}	—	campo eléctrico, $[\overline{\mathcal{E}}]$, pág. 19
$\epsilon_{\alpha\beta}$	—	tensor dieléctrico, [1], pág. 19
ϵ	—	coeficiente dieléctrico (o constante dieléctrica), [1], pág. 19
ϵ_a	—	anisotropía dieléctrica, [1], pág. 19
ϵ_{\parallel} y ϵ_{\perp}	—	coeficientes dieléctricos paralelo y perpendicular a \vec{n} , [1], pág. 19
l	—	longitud en que ocurren variaciones del parámetro de orden, [L], pág. 19
a	—	dimensión de las moléculas nemáticas, [L], pág. 19
x, y, z	—	coordenadas cartesianas, [L], pág. 20
$\hat{x}, \hat{y}, \hat{z}$	—	vectores unitarios cartesianos, pág. 20
∇	—	gradiente ($\nabla \equiv \partial_x \hat{x} + \partial_y \hat{y} + \partial_z \hat{z}$, en donde $\partial_j \equiv \partial/\partial x_j$, con $i = x, y, z$), $[L^{-1}]$, pág. 20

V	—	volumen, $[L^3]$, pág. 20
U	—	energía interna, $[ML^2t^{-2}]$, pág. 20
S	—	entropía, $[ML^2T^{-1}t^{-2}]$, pág. 20
dW	—	trabajo termodinámico generalizado, $[ML^2t^{-2}]$, pág. 20
σ_{ik}	—	tensor de esfuerzos, $[ML^{-1}t^{-2}]$, pág. 20
\bar{u}_{ik}	—	tensor de deformaciones, $[L^3]$, pág. 20
p	—	presión hidrostática, $[ML^{-1}t^{-2}]$, pág. 20
τ_{ik}	—	tensor de deformaciones elásticas, $[ML^{-1}t^{-2}]$, pág. 20
σ	—	densidad volumétrica de entropía, $[ML^{-1}T^{-1}t^{-2}]$, pág. 21
u_{ik}	—	tensor de densidad volumétrica de deformaciones, [1], pág. 21
\mathcal{U}	—	densidad volumétrica de energía interna, $[ML^{-1}t^{-2}]$, pág. 21
F	—	energía libre de Helmholtz, $[ML^2t^{-2}]$, pág. 21
\mathcal{F}	—	densidad volumétrica de energía libre de Helmholtz, $[ML^{-1}t^{-2}]$, pág. 21
\mathcal{F}_0 y \mathcal{U}_0	—	densidades de energía libre de Helmholtz e interna del sistema no deformado, $[ML^{-1}t^{-2}]$, pág. 22
\mathcal{F}_d y \mathcal{U}_d	—	densidades de energía libre de Helmholtz e interna del sistema deformado, $[ML^{-1}t^{-2}]$, pág. 22
\vec{u} (\vec{r})	—	campo vectorial arbitrario, $[u]$, pág. 22
$e_{\alpha\beta}$	—	parte simétrica del tensor $\partial_j n_i$, $[L^{-1}]$, pág. 22
ϵ_{lki}	—	tensor de Levi-Civita, pág. 22
C_∞	—	grupo de simetría, pág. 23
ϱ_i	—	constantes de proporcionalidad (con $i = 1, \dots, 5$), pág. 23
ι_i	—	constantes de proporcionalidad (con $i = 1, \dots, 3$), pág. 23
ϑ	—	constante de proporcionalidad, pág. 23
K_1, K_2 y K_3	—	coeficientes elásticos de Frank, $[MLt^{-2}]$, pág. 23
K_{ijkl}	—	tensor de deformaciones elásticas, $[MLt^{-2}]$, pág. 24
$\bar{\lambda}$ (\vec{r})	—	función arbitraria del método de multiplicadores de Lagrange, pág. 24
df_k	—	elemento diferencial de superficie, $[L^2]$, pág. 24
H_i	—	campo molecular, $[ML^{-1}t^{-2}]$, pág. 24
Φ_{ki}	—	tensor asociado a las deformaciones de \vec{n} , $[Mt^{-2}]$, pág. 24
h_i	—	componente transversal del campo molecular, $[ML^{-1}t^{-2}]$, pág. 25
δ_{il}^\perp	—	delta de Kronecker transversa, pág. 25
$\hat{\mathcal{A}}$	—	cantidad extensiva arbitraria de un fluido, $[u]$, pág. 27
\hat{A}	—	propiedad específica (densidad volumétrica) de $\hat{\mathcal{A}}$, $[uL^{-3}]$, pág. 27
t	—	tiempo, $[t]$, pág. 27
$\vec{J}_{\hat{A}}$	—	flujo o densidad de corriente de $\hat{\mathcal{A}}$, $[uL^{-2}t^{-1}]$, pág. 27

$\sigma_{\hat{A}}$	—	fuerza interna o de producción de \hat{A} por unidad de volumen y de tiempo, $[uL^{-3}t^{-1}]$, pág. 27
$\delta\hat{A}$, $\delta\vec{J}_{\hat{A}}$ y $\delta\sigma_{\hat{A}}$	—	desviaciones de las cantidades \hat{A} , $\vec{J}_{\hat{A}}$ y $\sigma_{\hat{A}}$, pág. 28
ρ	—	densidad volumétrica de masa, $[ML^{-3}]$, pág. 29
\mathcal{E}	—	densidad volumétrica de energía, $[ML^{-1}t^{-2}]$, pág. 29
\vec{v}	—	velocidad del flujo, $[Lt^{-1}]$, pág. 29
Π_{ij}	—	densidad de corriente de cantidad de movimiento, $[ML^{-1}t^{-2}]$, pág. 29
f_i	—	resultante de todas las fuerzas volumétricas externas por unidad de masa que actúan sobre el fluido, $[Lt^{-2}]$, pág. 29
q_i	—	flujo de calor de conducción, $[Mt^{-3}]$, pág. 30
ϕ	—	potencial del cual se obtiene f_i si ésta es conservativa, $[L^2t^{-2}]$, pág. 30
Q_i	—	densidad de corriente de energía, $[Mt^{-3}]$, pág. 31
\bar{g}_i	—	densidad de cantidad de movimiento, $[ML^{-2}t^{-1}]$, pág. 31
\mathfrak{p}	—	densidad de energía potencial, $[ML^{-1}t^{-2}]$, pág. 31
\mathcal{E}^0	—	densidad volumétrica de energía en el equilibrio, $[ML^{-1}t^{-2}]$, pág. 32
c_v	—	calor específico a volumen constante, $[L^2T^{-1}t^{-2}]$, pág. 32
$\vec{\omega}$	—	velocidad angular de un elemento de fluido respecto a un sistema de referencia que se mueve con él, $[t^{-1}]$, pág. 34
$\vec{\Omega}$	—	velocidad angular de los alrededores de un elemento de fluido, $[t^{-1}]$, pág. 34
\vec{N}	—	razón de cambio de \vec{n} en un elemento de volumen del fluido respecto a sus alrededores, $[t^{-1}]$, pág. 34
v_{ik}	—	parte simétrica del tensor $\partial v_i/\partial x_k$, $[t^{-1}]$, pág. 34
Ω_{ik}	—	parte antisimétrica del tensor $\partial v_i/\partial x_k$, $[t^{-1}]$, pág. 35
λ	—	alineamiento adimensional del flujo en un nemático, [1], pág. 35
λ_{ijk}	—	tensor adimensional nemático, [1], pág. 35
\mathcal{N}_i	—	derivadas espaciales del director, $[t^{-1}]$, pág. 36
J_{ij}^n	—	corriente tensorial del director, $[Lt^{-1}]$, pág. 36
σ_i^n	—	fuerza o producción del director, $[t^{-1}]$, pág. 36
Y_i	—	cuasicorriente del director, $[t^{-1}]$, pág. 36
\tilde{J}_k	—	densidad de corriente de entropía, $[MT^{-1}t^{-3}]$, pág. 37
σ_R	—	fuerza o producción de entropía, $[ML^{-1}T^{-1}t^{-3}]$, pág. 37
$2R$	—	función de disipación, $[ML^{-1}t^{-3}]$, pág. 37
\mathcal{G}_k	—	vector auxiliar, $[ML^{-2}t^{-2}]$, pág. 38
$\sigma_{ik}^{(r)}$	—	tensor auxiliar, $[ML^{-1}t^{-2}]$, pág. 38
χ_{ilk}	—	tensor antisimétrico, $[Mt^{-2}]$, pág. 38

σ'_{ij}	—	tensor de esfuerzos viscoso, $[ML^{-1}t^{-2}]$, pág. 39
s	—	densidad espacífica de entropía (entropía por unidad de masa), $[L^2T^{-1}t^{-2}]$, pág. 40
\bar{x}_k	—	variable extensiva arbitraria por unidad de volumen, $[u]$, pág. 42
J_k	—	flujo termodinámico, $[ut^{-1}]$, pág. 42
F_k	—	fuerza termodinámica, $[ML^{-1}T^{-1}t^{-2}u^{-1}]$, pág. 42
L_{jk} y L_{ijk}	—	coeficientes cinéticos de primero y segundo orden, pág. 43
$d\vec{S}$	—	elemento diferencial de área, $[L^2]$, pág. 43
σ_{ij}^R	—	componente reversible del tensor de esfuerzos, $[ML^{-1}t^{-2}]$, pág. 44
\tilde{J}_i^R	—	componente reversible de \tilde{J}_k , $[MT^{-1}t^{-3}]$, pág. 44
Q_i^R	—	componente reversible de Q_i , $[Mt^{-3}]$, pág. 44
Y_i^R	—	componente reversible de la cuasicorriente de \vec{n} , $[t^{-1}]$, pág. 44
σ_{ij}^D	—	componente disipativa del tensor de esfuerzos, $[ML^{-1}t^{-2}]$, pág. 44
\tilde{J}_i^D	—	componente disipativa de \tilde{J}_k , $[MT^{-1}t^{-3}]$, pág. 44
Q_j^D	—	componente disipativa de Q_i , $[Mt^{-3}]$, pág. 44
Y_i^D	—	componente disipativa de la cuasicorriente de \vec{n} , $[t^{-1}]$, pág. 44
$P_{ijkl}^{\sigma'_{ij}}, Q_{ijk}^{\sigma'_{ij}}, R_{ijk}^{\sigma'_{ij}}$	—	coeficientes cinéticos asociados con σ'_{ij} , pág. 45
$P_{ikl}^{q_i/T}, Q_{ik}^{q_i/T}, R_{ik}^{q_i/T}$	—	coeficientes cinéticos asociados con q_i/T , pág. 45
$P_{ikl}^{N_i}, Q_{ik}^{N_i}, R_{ik}^{N_i}$	—	coeficientes cinéticos asociados con N_i , pág. 45
ν_{iklm}	—	tensor de esfuerzos viscoso nemático, $[ML^{-1}t^{-1}]$, pág. 46
ν_i	—	viscosidades nemáticas (con $i = 1 \dots 5$), $[ML^{-1}t^{-1}]$, pág. 46
κ_{ij}	—	tensor de conductividad térmica, $[MLT^{-1}t^{-3}]$, pág. 47
κ_{\perp} y κ_{\parallel}	—	conductividades térmicas perpendicular y paralela respecto a \vec{n} , $[MLT^{-1}t^{-3}]$, pág. 47
γ_1 y γ_2	—	viscosidades de torsión, $[ML^{-1}t^{-1}]$, pág. 48

Capítulo 2

$\bar{a}(t)$	—	función aleatoria de un proceso estocástico multivariado, $[u]$, pág. 54
$\bar{a}_i(t)$	—	componentes de $\bar{a}(t)$ (con $i = 1 \dots n$), $[u]$, pág. 54
S_0	—	entropía en el estado de equilibrio, $[ML^2T^{-1}t^{-2}]$, pág. 54
k_B	—	constante de Boltzmann, $[ML^2T^{-1}t^{-2}]$, pág. 54
\bar{E}_{ij}	—	matriz simétrica positiva definida, $[u^{-2}]$, pág. 54
$W_1(\bar{a}, t)$	—	distribución de probabilidad de un tiempo, pág. 54
$P_2(\bar{a}', t' \bar{a}'', t'')$	—	función de distribución de probabilidad condicional, pág. 54
W_0 y P_0	—	constantes de normalización, respectivamente, de W_1 y P_2 , pág. 54
\hat{A}_{ij} y \hat{C}_{ij}	—	matrices simétricas positivas auxiliares, $[u^{-2}]$, pág. 54

\widehat{B}_{ij}	—	matriz auxiliar, $[u^{-2}]$, pág. 54
\widehat{D}_{ij}	—	matriz auxiliar, $[1]$, pág. 55
\overline{G}_{ij}	—	matriz independiente del tiempo sin una propiedad de simetría en particular, $[t^{-1}]$, pág. 55
\overline{S}_{ij} y \overline{A}_{ij}	—	parte simétrica y antisimétrica de la matriz \overline{G}_{ij} , $[t^{-1}]$, pág. 56
\overline{F}_i	—	fuerzas estocásticas, $[ut^{-1}]$, pág. 56
\overline{Q}_{ij}	—	matriz simétrica positiva definida, $[u^2t^{-1}]$, pág. 56
$\chi_{ij}(t'' - t')$	—	matriz de correlación de $\overline{a}_i(t')$ y $\overline{a}_j(t'')$, $[u^2]$, pág. 57
X_i	—	fuerzas termodinámicas, pág. 57
A	—	coeficiente material, $[L^2t^{-2}]$, pág. 60
B	—	coeficiente material, $[ML^{-1}T^{-1}t^{-2}]$, pág. 60
C	—	coeficiente material, $[L^2T^{-1}t^{-2}]$, pág. 60
c_T	—	velocidad isotérmica del sonido, $[Lt^{-1}]$, pág. 60
β	—	coeficiente de expansividad térmica, $[T^{-1}]$, pág. 60
κ_T	—	coeficiente de compresibilidad isotérmica, $[M^{-1}Lt^2]$, pág. 60
a_1, a_α, a_5 y a_μ	—	variables nemáticas de la misma dimensión, $[M^{1/2}L^{-3/2}]$, pág. 61
$\delta(\vec{r} - \vec{r}')$	—	delta de Dirac espacial, $[L^{-3}]$, pág. 62
$G_{ij}(\vec{r}, \vec{r}')$	—	matriz de coeficientes nemática, $[L^{-3}t^{-1}]$, pág. 62
$\delta(t - t')$	—	delta de Dirac temporal, $[t^{-1}]$, pág. 62
$S_{ij}(\vec{r}, \vec{r}')$	—	parte simétrica de G_{ij} , $[L^{-3}t^{-1}]$, pág. 62
$A_{ij}(\vec{r}, \vec{r}')$	—	parte antisimétrica de G_{ij} , $[L^{-3}t^{-1}]$, pág. 63
F_i	—	fuerzas estocásticas nemáticas, $[M^{1/2}L^{-3/2}t^{-1}]$, pág. 63
$Q_{ij}(\vec{r}, \vec{r}')$	—	matriz de fuerzas estocásticas nemáticas, $[ML^{-3}t^{-1}]$, pág. 63
$E_{ij}(\vec{r}, \vec{r}')$	—	matriz simétrica nemática, $[M^{-1}L^{-3}]$, pág. 65
$E_{ij}^{-1}(\vec{r}, \vec{r}')$	—	inversa de E_{ij} , $[ML^{-3}]$, pág. 66
$\Sigma_{ij}(\vec{r}, t)$	—	ruido asociado a σ'_{ij} , $[ML^{-1}t^{-2}]$, pág. 67
$\pi_l(\vec{r}, t)$	—	ruido asociado a q_l , $[Mt^{-3}]$, pág. 67
$\Upsilon_i(\vec{r}, t)$	—	ruido asociado a \mathcal{N}_i , $[t^{-1}]$, pág. 67
∇_i	—	$\nabla_i \equiv \partial/\partial x_i$ ($i = x, y, z$), $[L^{-1}]$, pág. 69
∇_i^2	—	$\nabla_i^2 \equiv \partial^2/\partial x_i^2$ ($i = x, y, z$), $[L^{-2}]$, pág. 69
c_p	—	calor específico a presión constante, $[L^2T^{-1}t^{-2}]$, pág. 70
$\chi_{\parallel}, \chi_{\perp}$	—	difusividades térmicas paralela y perpendicular a \vec{n} , $[L^2t^{-1}]$, pág. 70
γ	—	cociente de calores específicos, $[1]$, pág. 70

Capítulo 3

θ	—	ángulo de dispersión, $[1]$, pág. 74
ϵ_0	—	coeficiente dieléctrico en el estado de equilibrio, $[1]$, pág. 74

\vec{E}_i	—	campo eléctrico incidente de magnitud E_0 , $[\mathcal{E}]$, pág. 75
\hat{i} y \hat{f}	—	polarizabilidades de los haces incidente y dispersado, [1], pág. 75
\vec{k}_i y \vec{k}_f	—	vectores de onda de los haces incidente y dispersado, $[L^{-1}]$, pág. 75
ω_i y ω_f	—	frecuencias angulares de los haces incidente y dispersado, $[t^{-1}]$, pág. 75
$I_{\alpha\beta}$	—	tensor unitario de segundo rango, [1], pág. 75
$\vec{E}_s(R, t)$	—	campo eléctrico dispersado de magnitud $E_s(R, t)$, $[\mathcal{E}]$, pág. 75
R	—	magnitud de la posición \vec{R} a la que se mide el campo eléctrico dispersado respecto del medio dispersor, $[L]$, pág. 75
$\delta\epsilon_{if}(\vec{r}, t)$	—	componente de las fluctuaciones del tensor dieléctrico $\delta\epsilon_{\alpha\beta}(\vec{r}, t)$ a lo largo de las direcciones \hat{i} y \hat{f} , [1], pág. 76
$\delta\epsilon_{if}(\vec{k}, t)$	—	transformada de Fourier espacial de $\delta\epsilon_{if}(\vec{r}, t)$, $[L^3]$, pág. 76
λ_i y λ_f	—	longitudes de onda en el vacío de los haces incidente y dispersado, $[L]$, pág. 76
P	—	plano de dispersión, pág. 76
n	—	índice de refracción del medio dispersor, [1], pág. 76
$I_B(\omega)$	—	densidad espectral (o espectro de potencia) de una propiedad específica arbitraria B de un sistema, $[u^2t]$, pág. 78
$C_E(\vec{k}, t)$	—	autocorrelación de $\vec{E}_s(R, t)$, $[\mathcal{E}^2]$, pág. 78
I_0	—	intensidad del haz incidente, $[\mathcal{E}^2]$, pág. 78
$I_0(\vec{k})$	—	transformada de Fourier espacial de I_0 , $[\mathcal{E}^2 L^3]$, pág. 78
$I_{if}(\vec{k}, \omega_f, R)$	—	densidad espectral de la luz dispersada, $[\mathcal{E}^2 t]$, pág. 78
$I_{if}^\epsilon(\vec{k}, \omega)$	—	densidad espectral de $I_{if}^\epsilon(\vec{k}, t)$, $[L^3 t]$, pág. 78
$I_{if}^\epsilon(\vec{k}, t)$	—	autocorrelación de $\delta\epsilon_{if}(\vec{k}, t)$, $[L^3]$, pág. 78
I_{VV}	—	componente polarizada de los haces incidente y dispersado verticales V respecto a P , $[L^3 t]$, pág. 79
I_{HH}	—	componente de los haces incidente y dispersado horizontales H respecto a P , $[L^3 t]$, pág. 79
I_{VH}, I_{HV}	—	componentes de los haces incidente vertical V (horizontal H) y dispersado horizontal H (vertical V) respecto a P , $[L^3 t]$, pág. 79
$I_{if}^\epsilon(\vec{k})$	—	integral de $I_{if}^\epsilon(\vec{k}, \omega)$ sobre todas las frecuencias, $[L^3]$, pág. 79
k_\perp y k_\parallel	—	componentes de \vec{k} perpendicular y paralela a \vec{n}_0 , $[L^{-1}]$, pág. 80
\hat{e}_2	—	vector unitario perpendicular al plano formado por \vec{n}_0 y \vec{k} , pág. 82
\hat{e}_1	—	vector unitario perpendicular al plano formado por \hat{e}_2 y \vec{n}_0 , pág. 82
δn_1 y δn_2	—	componentes de $\delta\vec{n}$ en las direcciones \hat{e}_1 y \hat{e}_2 , pág. 82
i_0 y f_0	—	coeficientes de proyección de \hat{i} y \hat{f} en la dirección de \vec{n}_0 , pág. 82
i_α y f_α	—	coeficientes de proyección de \hat{i} y \hat{f} en la dirección \hat{e}_α , pág. 82

$C_I(\vec{k}, t)$	—	función de correlación de la intensidad dispersada, $[\bar{\mathcal{E}}^4]$, pág. 83
$I_s(\vec{k}, t)$	—	valor instantáneo de la intensidad de $\vec{E}_s(R, t)$, $[\bar{\mathcal{E}}^2]$, pág. 83
$g^{(1)}(t)$ y $g^{(2)}(t)$	—	correlaciones normalizadas de primero y segundo orden, págs. 83 y 84
$C_\epsilon(\vec{k}, t)$	—	otra forma de escribir a $I_{if}(\vec{k}, t)$, $[L^3]$, pág. 84
Γ_d	—	tasa de relajación de las fluctuaciones dieléctricas, $[t^{-1}]$, pág. 84
$\pm\omega_B$	—	frecuencias de los picos de Brillouin en el espectro, $[t^{-1}]$, pág. 85

Capítulo 4

ξ	—	longitud de correlación de orden microscópico, $[L]$, pág. 89
d	—	espesor de la celda nemática, $[L]$, pág. 91
\vec{g}	—	fuerza gravitacional constante de magnitud g , $[Lt^{-2}]$, pág. 91
T_1 y T_2	—	temperaturas fijas de las placas de la celda nemática, $[T]$, pág. 91
α	—	gradiente de temperatura de magnitud $\nabla_z T$, $[TL^{-1}]$, pág. 91
$\nabla_z p$	—	gradiente de presión debido a la fuerza gravitacional, $[ML^{-2}t^{-2}]$, pág. 91
ψ	—	conjunto de variables nematodinámicas, pág. 91
ΔT	—	diferencia de temperaturas entre las placas de la celda, $[T]$, pág. 92
c_s	—	velocidad adiabática del sonido, $[Lt^{-1}]$, pág. 92
X	—	gradiente de temperatura efectivo, $[L^{-1}T]$, pág. 92
κ_a	—	conductividad térmica anisótropa, $[MLT^{-1}t^{-3}]$, pág. 97
χ_a	—	difusividad térmica anisótropa, $[L^2t^{-1}]$, pág. 97
$\delta\varphi$	—	divergencia de $\delta\vec{v}$, $[t^{-1}]$, pág. 99
$\delta\psi$	—	componente z del rotacional de $\delta\vec{v}$, $[t^{-1}]$, pág. 99
$\delta\xi$	—	componente z del doble rotacional de $\delta\vec{v}$, $[L^{-1}t^{-1}]$, pág. 99
δf_1	—	divergencia de $\delta\vec{n}$, $[L^{-1}]$, pág. 99
δf_2	—	componente z del rotacional de $\delta\vec{n}$, $[L^{-1}]$, pág. 99
∇^2	—	$\nabla^2 = \nabla_{\parallel}^2 + \nabla_{\perp}^2$ (con $\nabla_{\perp}^2 = \nabla_x^2 + \nabla_y^2$ y $\nabla_{\parallel}^2 = \nabla_z^2$), $[L^{-2}]$, pág. 100
$\tilde{\mathcal{H}}(\vec{k}, \omega)$	—	transformada de Fourier de un campo $\mathcal{H}(\vec{r}, t)$ arbitrario, $[uL^3t]$, pág. 100
$\delta\vec{X}(\vec{k}, t)$	—	vector cuyas componentes son la transformada de Fourier espacial de las variables δp , $\delta\varphi$, δs , $\delta\psi$, $\delta\xi$, δf_1 y δf_2 , pág. 100
$\delta\vec{X}^L(\vec{k}, t)$	—	componente longitudinal de $\delta\vec{X}$, pág. 100
$\delta\vec{X}^T(\vec{k}, t)$	—	componente transversal de $\delta\vec{X}(\vec{k}, t)$, pág. 100
M	—	matriz de coeficientes del sistema lineal para $\delta\vec{X}(\vec{k}, t)$, pág. 100
M^L y M^T	—	submatrices longitudinal y transversal de M , págs. 100 y 101
D_T	—	coeficiente térmico anisótropo, $[L^2t^{-1}]$, pág. 101
$\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3$ y σ_4	—	coeficientes viscosos anisótropos, $[L^2t^{-1}]$, pág. 101

K_I y K_{II}	—	coeficientes elásticos anisótropos, $[MLt^{-2}]$, pág. 101
Ω , λ_- y λ_+	—	coeficientes adimensionales anisótropos, pág. 101
$\vec{\Theta}(\vec{k}, t)$	—	vector de términos estocásticos del sistema lineal para $\delta\vec{X}(\vec{k}, t)$, pág. 101
$\vec{\Theta}^L(\vec{k}, t)$	—	componente longitudinal de $\vec{\Theta}(\vec{k}, t)$, pág. 101
$\vec{\Theta}^T(\vec{k}, t)$	—	componente transversal de $\vec{\Theta}(\vec{k}, t)$, pág. 101
M_E	—	matriz de coeficientes M en el estado de equilibrio, pág. 102
M_E^L y M_E^T	—	submatrices longitudinal y transversal de M_E , pág. 102
η , ζ	—	viscosidades de corte y volumétrica de un fluido simple, $[ML^{-1}t^{-1}]$, pág. 103
ν	—	viscosidad cinemática de un fluido simple, $[L^2t^{-1}]$, pág. 103
χ	—	difusividad térmica de un fluido simple, $[L^2t^{-1}]$, pág. 103
M^{Fs}	—	matriz de coeficientes del fluido simple fuera de equilibrio, pág. 103
$z_i(\vec{k}, t)$	—	variables de igual dimensión (con $i = 1, \dots, 7$), $[M^{1/2}L^{5/2}t^{-1}]$, pág. 103
$\vec{Z}(\vec{k}, t)$	—	vector de las variables $z_i(\vec{k}, t)$, $[M^{1/2}L^{5/2}t^{-1}]$, pág. 103
$\vec{Z}^L(\vec{k}, t)$	—	componente longitudinal de $\vec{Z}(\vec{k}, t)$, $[M^{1/2}L^{5/2}t^{-1}]$, pág. 103
$\vec{Z}^T(\vec{k}, t)$	—	componente transversal de $\vec{Z}(\vec{k}, t)$, $[M^{1/2}L^{5/2}t^{-1}]$, pág. 103
N	—	matriz de coeficientes del sistema lineal para $\delta\vec{Z}(\vec{k}, t)$, $[t^{-1}]$, pág. 103
N^L y N^T	—	submatrices longitudinal y transversal de N , pág. 104
$\vec{\Xi}(\vec{k}, t)$	—	vector de ruidos del sistema lineal para $\vec{Z}(\vec{k}, t)$, $[M^{1/2}L^{5/2}t^{-2}]$, pág. 104
$\vec{\Xi}^L(\vec{k}, t)$	—	componente longitudinal de $\vec{\Xi}(\vec{k}, t)$, $[M^{1/2}L^{5/2}t^{-2}]$, pág. 100
$\vec{\Xi}^T(\vec{k}, t)$	—	componente transversal de $\vec{\Xi}(\vec{k}, t)$, $[M^{1/2}L^{5/2}t^{-2}]$, pág. 100
$p(\lambda)$	—	polinomio característico de la matriz N , $[t^{-7}]$, pág. 105
$p^L(\lambda)$	—	polinomio característico de la submatriz N^L , $[t^{-5}]$, pág. 105
$p^T(\lambda)$	—	polinomio característico de la submatriz N^T , $[t^{-2}]$, pág. 105
λ	—	eigenvalores de $p(\lambda)$, $[t^{-1}]$, pág. 105
$\vec{Z}_X^L(\vec{k}, t)$	—	componente del vector $\vec{Z}^L(\vec{k}, t)$, $[M^{1/2}L^{5/2}t^{-1}]$, pág. 105
$\vec{Z}_Y^L(\vec{k}, t)$	—	componente del vector $\vec{Z}^L(\vec{k}, t)$, $[M^{1/2}L^{5/2}t^{-1}]$, pág. 105
N_{XX}^L y N_{YY}^L	—	submatrices de N^L , $[t^{-1}]$, pág. 105
$\vec{\Xi}_X^L(\vec{k}, t)$	—	componente de los ruidos $\vec{\Xi}^L(\vec{k}, t)$, $[M^{1/2}L^{5/2}t^{-2}]$, pág. 105
$\vec{\Xi}_Y^L(\vec{k}, t)$	—	componente de los ruidos $\vec{\Xi}^L(\vec{k}, t)$, $[M^{1/2}L^{5/2}t^{-2}]$, pág. 105
$p_{XX}^L(\lambda)$	—	polinomio característico de la submatriz N_{XX}^L , $[t^{-2}]$, pág. 105
$p_{YY}^L(\lambda)$	—	polinomio característico de la submatriz N_{YY}^L , $[t^{-3}]$, pág. 105
$\bar{\omega}$	—	parámetro auxiliar, $[t^{-1}]$, pág. 106
a_0 , a'_0 y a''_0	—	cantidades adimensionales pequeñas longitudinales, pág. 106

a_1, a'_1 y a_2	—	cantidades adimensionales pequeñas longitudinales, pág. 106
a_3, a_5 y a_6	—	cantidades adimensionales pequeñas longitudinales, pág. 106
\bar{s}	—	parámetro adimensional auxiliar, pág. 106
$p_{XX}^L(\bar{s})$	—	polinomio $p_{XX}^L(\lambda)$ reescrito en términos de \bar{s} , [1], pág. 106
A'_1 y A'_2	—	coeficientes adimensionales del polinomio $p_{XX}^L(\bar{s})$, pág. 106
\bar{s}_+, \bar{s}_- y Δ'	—	raíces y discriminante de $p_{XX}^L(\bar{s}) = 0$, pág. 107
λ_1 y λ_2	—	modos hidrodinámicos longitudinales acústicos, $[t^{-1}]$, pág. 107
Γ	—	coeficiente de atenuación del sonido en un nemático, $[L^2t^{-1}]$, pág. 107
$p_{YY}^L(\bar{s})$	—	polinomio $p_{YY}^L(\lambda)$ reescrito en términos de \bar{s} , [1], pág. 107
A_1, A_2 y A_3	—	coeficientes adimensionales del polinomio $p_{YY}^L(\bar{s})$, págs. 107-108
$\bar{s}_3, \bar{s}_4, \bar{s}_5$ y Δ	—	raíces y discriminante de $p_{YY}^L(\bar{s}) = 0$, pág. 108
\bar{F}	—	factor en los terceros términos de las raíces \bar{s}_3, \bar{s}_4 y \bar{s}_5 , pág. 108
λ_3 y λ_4	—	modos longitudinales visco-calóricos, $[t^{-1}]$, pág. 108
λ_5	—	modo longitudinal del director, $[t^{-1}]$, pág. 109
$\hat{k}_\perp \equiv k_\perp/k$	—	vector unitario de \vec{k}_\perp , pág. 109
R_0	—	valor del número de Rayleigh a partir del cual los modos visco-calóricos pueden ser propagativos, [1], pág. 110
Ω_0	—	parte real de λ_3 y λ_4 cuando son propagativos, $[t^{-1}]$, pág. 110
Λ_0	—	parte imaginaria de λ_3 y λ_4 cuando son propagativos, $[t^{-1}]$, pág. 110
λ_3^e, λ_4^e y λ_5^e	—	modos difusivos térmico, de cizalla y del director de un nemático en el estado de equilibrio, $[t^{-1}]$, pág. 111
a_4, a'_5 y a'_6	—	cantidades adimensionales pequeñas transversales, pág. 112
$p^T(\bar{s})$	—	polinomio $p^T(\lambda)$ reescrito en términos de \bar{s} , [1], pág. 112
A''_1 y A''_2	—	coeficientes adimensionales del polinomio $p^T(\bar{s})$, pág. 112
\bar{s}'_+, \bar{s}'_- y Δ''	—	raíces y discriminante de $p^T(\bar{s}) = 0$, pág. 112
λ_6 y λ_7	—	modos hidrodinámicos transversales de cizalla y del director, $[t^{-1}]$, pág. 113
λ_1^e y λ_2^e	—	modos hidrodinámicos longitudinales acústicos nemáticos en el estado de equilibrio, $[t^{-1}]$, pág. 113
λ_6^e y λ_7^e	—	modos hidrodinámicos transversales de cizalla y del director en el estado de equilibrio, $[t^{-1}]$, pág. 114
Γ'	—	coeficiente de atenuación del sonido de un fluido simple, $[L^2t^{-1}]$, pág. 114

Capítulo 5

$\left(\frac{\partial \epsilon_\perp}{\partial \rho}\right)_T$	—	variación de ϵ_\perp con la densidad a temperatura fija, $[M^{-1}L^3]$, pág. 120
$\left(\frac{\partial \epsilon_a}{\partial \rho}\right)_T$	—	variación de ϵ_a con la densidad a temperatura fija, $[M^{-1}L^3]$, pág. 120
$S_{ss}(\vec{k}, \omega)$	—	densidad espectral de $\langle \delta s(\vec{k}, t) \delta s^*(\vec{k}, 0) \rangle$, $[L^7T^{-2}t^{-3}]$, pág. 120

$S_{sn\beta}(\vec{k}, \omega)$	—	densidad espectral de $\langle \delta s(\vec{k}, t) \delta n_{\beta}^*(\vec{k}, 0) \rangle$, $[L^5 T^{-1} t^{-1}]$, pág. 120
$S_{n_{\alpha}s}(\vec{k}, \omega)$	—	densidad espectral de $\langle \delta n_{\alpha}(\vec{k}, t) \delta s^*(\vec{k}, 0) \rangle$, $[L^5 T^{-1} t^{-1}]$, pág. 120
$S_{n_{\alpha}n_{\beta}}(\vec{k}, \omega)$	—	densidad espectral de $\langle \delta n_{\alpha}(\vec{k}, t) n_{\beta}^*(\vec{k}, 0) \rangle$, $[L^3 t]$, pág. 120
$S_{f_1 f_1}(\vec{k}, \omega)$	—	densidad espectral de $\langle \delta f_1(\vec{k}, t) \delta f_1^*(\vec{k}, 0) \rangle$, $[L t]$, pág. 121
$S_{f_1 s}(\vec{k}, \omega)$,	—	densidad espectral de $\langle \delta f_1(\vec{k}, t) \delta s^*(\vec{k}, 0) \rangle$, $[L^4 T^{-1} t^{-1}]$, pág. 121
$S_{s f_1}(\vec{k}, \omega)$,	—	densidad espectral de $\langle \delta s(\vec{k}, t) \delta f_1^*(\vec{k}, 0) \rangle$, $[L^4 T^{-1} t^{-1}]$, pág. 121
$D_i(\vec{k}, \omega)$	—	coeficientes del factor de estructura dinámico $S(\vec{k}, \omega)$ fuera del equilibrio (con $i = 3, 4, 5$), $[M^{-1} L t^2]$, pág. 121
F_1, G_1 y H_1	—	coeficientes del factor de estructura $S(\vec{k}, \omega)$ fuera del equilibrio cuando λ_3 y λ_4 son propagativos, [1], pág. 123
F_2 y G_2	—	coeficientes del factor de estructura $S(\vec{k}, \omega)$ fuera del equilibrio cuando λ_3 y λ_4 son propagativos, [t], pág. 123
$\tilde{\omega}$	—	frecuencia angular normalizada, [1], pág. 125
$\tilde{S}(\vec{k}, \tilde{\omega})$	—	factor de estructura dinámico normalizado, [1], pág. 125
$\bar{\lambda}_3, \bar{\lambda}_4$ y $\bar{\lambda}_5$	—	parámetros, $[L^2 t^{-1}]$, pág. 125
$E_i(\vec{k})$	—	coeficientes del factor de estructura $S(\vec{k}, \omega)$ (con $i = 3, 4, 5$), [1], págs. 125-126
$E_i^{neq}(\vec{k})$	—	amplitudes de las fluctuaciones de no equilibrio de $E_i(\vec{k})$ (con $i = 3, 4, 5$), [1], pág. 126
$E_i^*(\vec{k})$	—	coeficientes de las amplitudes de las fluctuaciones de no equilibrio (con $i = 3, 4, 5$), $[L^{-2} T^{-2}]$, pág. 126
$I(\vec{k}, t)$	—	función de dispersión intermedia de van Hove, $[L^3]$, pág. 132
$I^{prop}(\vec{k}, t)$	—	función de van Hove para λ_3, λ_4 y λ_5 (cuando λ_3 y λ_4 son propagativos), $[L^3]$, pág. 132
$I^{dif}(\vec{k}, t)$	—	función de van Hove para λ_3, λ_4 y λ_5 (cuando λ_3 y λ_4 son difusivos), $[L^3]$, pág. 132
$\tilde{I}^{dif}(\vec{k}, t)$	—	coeficiente de $I^{dif}(\vec{k}, t)$, $[M^{-1} L t^2]$, pág. 132
$C(k, t)$	—	función de correlación experimental del campo eléctrico dispersado (en la referencia [33]), pág. 133
C_0	—	intensidad de la señal cuando $\nabla T = 0$ (en [33]), pág. 133
C_B	—	contribución de fondo a la señal (en [33]), pág. 133

Capítulo 6

∇p	—	gradiente de presión, $[M L^{-2} t^{-2}]$, pág. 136
$v_y^0(z)$	—	flujo de tipo Poiseuille a lo largo del eje y , $[L t^{-1}]$, pág. 136
γ_p	—	gradiente de presión adimensional, pág. 137

\tilde{a}	—	coeficiente del término lineal de $v_y^0(z)$, $[Lt^{-1}]$, pág. 137
\tilde{b}	—	coeficiente del término cuadrático de $v_y^0(z)$, $[Lt^{-1}]$, pág. 137
L	—	longitud de las placas, $[L]$, pág. 138
\hat{k}_k^2	—	cantidad que depende de K_2 y K_3 , $[ML^{-1}t^{-2}]$, pág. 140
$\hat{\mu}_k^2$	—	cantidad que depende de ν_2 , ν_3 y ρ_0 , $[t^{-1}]$, pág. 140
$\hat{\alpha}$ y $\hat{\epsilon}$	—	coeficientes del sistema bidimensional para las variables $\delta\tilde{n}_k$ y $\delta\tilde{v}_k$, $[t^{-1}]$, pág. 140
$\hat{\beta}$	—	coeficiente del sistema para las variables $\delta\tilde{n}_k$ y $\delta\tilde{v}_k$, $[L^{-1}]$, pág. 140
$\hat{\chi}$	—	coeficiente del sistema para las variables $\delta\tilde{n}_k$ y $\delta\tilde{v}_k$, $[Lt^{-2}]$, pág. 140
$\delta\tilde{n}_{k\pm mq}$	—	abreviatura de $\delta\tilde{n}(k_z \pm mq, \omega)$ (con $m = 0, 1, 2$), $[L^3t]$, pág. 140
$\delta\tilde{v}_{k\pm mq}$	—	abreviatura de $\delta\tilde{v}(k_z \pm mq, \omega)$ (con $m = 0, 1, 2$), $[L^4]$, pág. 140
q	—	parámetro en $\frac{1}{q}\text{sen}(qz)$, $[L^{-1}]$, pág. 141
$\chi(\vec{k}, \omega)$	—	factor de estructura dinámico, $[\bar{\mathcal{E}}^2t]$, pág. 141
$\delta\tilde{n}_{k\omega}^0$ y $\delta\tilde{n}_{k\omega}^1$	—	contribuciones de $\delta\tilde{n}_{k\omega}$, respectivamente, a orden cero y uno en el parámetro γ_p , $[L^3t]$, pág. 141
$\delta\tilde{v}_{k\omega}^0$ y $\delta\tilde{v}_{k\omega}^1$	—	contribuciones de $\delta\tilde{v}_{k\omega}$, respectivamente, a orden cero y uno en el parámetro γ_p , $[L^4]$, pág. 141
$\chi^{eq}(\vec{k}, \omega)$	—	componente de $\chi(\vec{k}, \omega)$ en el estado de equilibrio, $[\bar{\mathcal{E}}^2t]$, pág. 142
$\chi^{neq}(\vec{k}, \omega)$	—	componente de $\chi(\vec{k}, \omega)$ en el estado fuera de equilibrio, $[\bar{\mathcal{E}}^2t]$, pág. 142
$\tilde{\Sigma}_{xj}^k$	—	abreviatura de $\tilde{\Sigma}_{xj}(\vec{k}, \omega)$, $[ML^2t^{-1}]$, pág. 142
$\tilde{\Upsilon}_x^k$	—	abreviatura de $\tilde{\Upsilon}_x(\vec{k}, \omega)$, $[L^3]$, pág. 142
$A_{\omega k}$	—	coeficiente de la combinación lineal de $\tilde{\Upsilon}_x^k$ y $k_j\tilde{\Sigma}_{xj}^k$ para $\delta\tilde{n}_{k\omega}^0$, $[t]$, pág. 142
$B_{\omega k}$	—	coeficiente de la combinación lineal de $\tilde{\Upsilon}_x^k$ y $k_j\tilde{\Sigma}_{xj}^k$ para $\delta\tilde{n}_{k\omega}^0$, $[M^{-1}L^2t^2]$, pág. 142
$C_{\omega k}$	—	coeficientes de la combinación lineal de $\tilde{\Upsilon}_x^k$ y $k_j\tilde{\Sigma}_{xj}^k$ para $\delta\tilde{v}_{k\omega}^0$, $[L]$, pág. 142
$D_{\omega k}$	—	coeficientes de la combinación lineal de $\tilde{\Upsilon}_x^k$ y $k_j\tilde{\Sigma}_{xj}^k$ para $\delta\tilde{v}_{k\omega}^0$, $[M^{-1}L^3t]$, pág. 142
$\bar{\Gamma}$	—	parámetro, $[t^{-4}]$, pág. 142
$\hat{\lambda}_k^4$	—	parámetro, $[t^{-2}]$, pág. 142
$\hat{\xi}_k^2$	—	parámetro, $[t^{-1}]$, pág. 142
$\bar{\lambda}^2$	—	parámetro, $[M^{-1}L^3]$, pág. 142
$\delta\pi_{k\pm mq}$	—	coeficiente presente en las expresiones para $\delta\tilde{n}_{k\omega}^1$ y $\delta\tilde{v}_{k\omega}^1$ (con $m = 0, 1, 2$), $[L^3t]$, pág. 143

$\delta\sigma_{k\pm m q}$	—	coeficiente presente en las expresiones para $\delta\tilde{n}_{k\omega}^1$ y $\delta\tilde{v}_{k\omega}^1$ (con $m = 0, 1, 2$), $[L^4]$, pág. 143
$\hat{\omega}$	—	frecuencia angular de referencia, $[t^{-1}]$, pág. 144
$\tilde{\omega}$	—	frecuencia angular adimensional, [1], pág. 144
$S(\tilde{\omega})$	—	factor de estructura dinámico adimensional, pág. 144
$S^{eq}(\tilde{\omega})$ y $S^{neq}(\tilde{\omega})$	—	componentes adimensionales de $S(\tilde{\omega})$ en el estado de equilibrio y fuera de equilibrio, pág. 144
$ \nabla\pi $	—	gradiente de presión adimensional, pág. 144
$\tilde{\omega}_r$	—	raíz real de la ecuación polinomial cúbica para $\tilde{\omega}$, [1], pág. 145
$\Delta(\vec{k}, \tilde{\omega})$	—	cociente de $ \chi^{neq}(\vec{k}, \omega) $ entre $\chi^{eq}(\vec{k}, \omega)$, [1], pág. 145
$\Delta^*(\tilde{\omega}^*)$	—	valor máximo de $\Delta(\vec{k}, \tilde{\omega})$ para \vec{k} fija cuando $\tilde{\omega} = \tilde{\omega}^*$, [1], pág. 146
$\tilde{\omega}_{\text{máx}}$	—	frecuencia para la cual $S(\tilde{\omega} = \tilde{\omega}_{\text{máx}})$ es máximo, [1], pág. 146
Ψ	—	cociente de $S(\tilde{\omega} = \tilde{\omega}_{\text{máx}}) - S^{eq}(\tilde{\omega} = 0)$ entre $S^{eq}(\tilde{\omega} = 0)$, [1], pág. 146

Apéndice A

$\tilde{\pi}_i(\vec{k}, t)$	—	transformada de Fourier espacial de $\pi_i(\vec{r}, t)$, $[ML^3t^{-3}]$, pág. 153
$\tilde{\Sigma}_{ij}(\vec{k}, t)$	—	transformada de Fourier espacial de $\Sigma_{ij}(\vec{r}, t)$, $[ML^2t^{-2}]$, pág. 153
$\tilde{\Upsilon}_i(\vec{k}, t)$	—	transformada de Fourier espacial de $\Upsilon_i(\vec{r}, t)$, $[L^3t^{-1}]$, pág. 153
$\zeta_i(\vec{k}, t)$	—	transformada de Fourier espacial de $\zeta_i(\vec{r}, t)$, $[M^{1/2}L^{5/2}t^{-2}]$, pág. 153
$\tilde{T}^{st}(\vec{k}, \vec{q}, \vec{s})$	—	transformada de Fourier espacial del perfil de temperatura $T^{st}(z)$, $[L^3T]$, pág. 153

Apéndice B

N_{XY}^L y N_{YX}^L	—	submatrices de N^L , $[t^{-1}]$, pág. 157-158
ϵ_i	—	parámetros pequeños adimensionales (con $i = 1, \dots, 4$), pág. 158
$\hat{\Gamma}', \hat{\Gamma}''$ y $\hat{\Gamma}'''$	—	cantidades de igual dimensión, $[L^2t^{-1}]$, pág. 158
A_1, A_2 y A_3	—	coeficientes de la ecuación polinomial cúbica $p_{YY}^L(\bar{s})$, [1], pág. 161
\bar{s}_1, \bar{s}_2 y \bar{s}_3	—	raíces de $p_{YY}^L(\bar{s})$, [1], pág. 161
S_1, S_2, Q y \bar{R}	—	cantidades involucradas en las raíces \bar{s}_i , pág. 161
Δ	—	discriminante en las raíces \bar{s}_i , pág. 161
Δ'	—	discriminante en las raíces \bar{s}_i cuando $A_3 = 0$, pág. 162
ϵ	—	parte imaginaria del número complejo $1 + i\epsilon$, pág. 162
\hat{r} y $\hat{\theta}$	—	módulo y argumento del número $1 + i\epsilon$, pág. 163
$\omega_1^\pm, \omega_2^\pm$ y ω_3^\pm	—	raíces del número $(1 \pm i\epsilon)^{1/3}$, pág. 163
W_1, W_2 y W_3	—	términos en los coeficientes de la ecuación polinomial cúbica $p_{YY}^L(\bar{s})$, [1], pág. 167
Δ_0	—	discriminante auxiliar, pág. 168

Apéndice C

B_{13}	—	coeficiente de la autocorrelación promediada de $z_3(\vec{k}, \omega)$, $[t^{-1}]$, pág. 170
B_{23}	—	coeficiente de la autocorrelación promediada de $z_3(\vec{k}, \omega)$, $[t^{-3}]$, pág. 170
B_{33}	—	coeficiente de la autocorrelación promediada de $z_3(\vec{k}, \omega)$, $[t^{-5}]$, pág. 170
$C_{i3}(\vec{k})$	—	coeficientes de la autocorrelación promediada de $z_3(\vec{k}, \omega)$ escrita en fracciones parciales (con $i = 3, 4, 5$), [1], pág. 170
B_{15}	—	coeficiente de la autocorrelación promediada de $z_5(\vec{k}, \omega)$, $[t^{-1}]$, pág. 171
B_{25}	—	coeficiente de la autocorrelación promediada de $z_5(\vec{k}, \omega)$, $[t^{-3}]$, pág. 171
B_{35}	—	coeficiente de la autocorrelación promediada de $z_5(\vec{k}, \omega)$, $[t^{-5}]$, pág. 171
$C_{i5}(\vec{k})$	—	coeficientes de la autocorrelación promediada de $z_5(\vec{k}, \omega)$ escrita en fracciones parciales (con $i = 3, 4, 5$), [1], pág. 171-172
$B_{135} = -B_{153}$	—	coeficientes de la correlación promediada de $z_3(\vec{k}, \omega)$ y $z_5(\vec{k}, \omega)$, $[t^{-2}]$, págs. 172-173
$B_{235} = B_{253}$	—	coeficientes de la correlación promediada de $z_3(\vec{k}, \omega)$ y $z_5(\vec{k}, \omega)$, $[t^{-3}]$, págs. 172-173
$B_{335} = -B_{353}$	—	coeficientes de la correlación promediada de $z_3(\vec{k}, \omega)$ y $z_5(\vec{k}, \omega)$, $[t^{-4}]$, págs. 172-173
$B_{435} = B_{453}$	—	coeficientes de la correlación promediada de $z_3(\vec{k}, \omega)$ y $z_5(\vec{k}, \omega)$, $[t^{-5}]$, págs. 173-174
$C_{i35}(\vec{k}, \omega)$	—	coeficientes de la correlación promediada de $z_3(\vec{k}, \omega)$ y $z_5(\vec{k}, \omega)$ escrita en fracciones parciales (con $i = 3, 4, 5$), [1], pág. 173-174
$C_{i53}(\vec{k}, \omega)$	—	coeficientes de la correlación promediada de $z_5(\vec{k}, \omega)$ y $z_3(\vec{k}, \omega)$ escrita en fracciones parciales (con $i = 3, 4, 5$), [1], pág. 173-174

Apéndice D

$\left(\frac{\partial \epsilon_{\parallel}}{\partial \rho}\right)_T$	—	variación de ϵ_{\parallel} con la densidad a temperatura fija, $[M^{-1}L^3]$, pág. 178
$\left(\frac{\partial \epsilon_{\perp}}{\partial T}\right)_{\rho}$	—	variación de ϵ_{\perp} con la temperatura a densidad fija, $[T^{-1}]$, pág. 178
$\left(\frac{\partial \epsilon_{\parallel}}{\partial T}\right)_{\rho}$	—	variación de ϵ_{\parallel} con la temperatura a densidad fija, $[T^{-1}]$, pág. 178
$\tilde{\lambda}_3, \tilde{\lambda}_4$ y $\tilde{\lambda}_5$	—	modos λ_3, λ_4 y λ_5 normalizados, [1], pág. 182

Índice alfabético

- Afinidad termodinámica, *véase* fuerza termodinámica
- Alas de Rayleigh, *véase* Dispersión de luz de un cristal líquido nemático, espectro en equilibrio
- Cambio de representación
- a las variables termodinámicas presión y entropía específica, 96
 - a un nuevo conjunto de variables para la velocidad y el director, 98
- Campo
- gravitatorio constante, 91
 - molecular, *véase* Descripción termodinámica de cristales líquidos nemáticos
- Cantidades pequeñas o reducidas, 106, 112
- Casos límite de las ecuaciones nematodinámicas en un sistema de Rayleigh-Bénard
- nemático en equilibrio y fluido simple en un sistema de Rayleigh-Bénard, 102
- Coefficiente de atenuación del sonido
- de un fluido simple, 114
 - de un nemático, 107
- Coefficientes cinéticos de Onsager
- de primero y segundo orden, 43
- Cristales líquidos
- características generales, 14
 - clasificación, 14
 - nemáticos
 - anisotropía dieléctrica, 19
 - campo director, 17
 - características más representativas, 17
 - configuración homeotrópica, 91, 136
 - deformaciones elásticas, 19
 - descripción hidrodinámica, 27
 - descripción termodinámica, 20
 - parámetro de orden, 15
 - parámetros materiales del MBBA, 185
 - simetrías particulares, 17
 - tensor dieléctrico, 81
- propiedades de simetría, 15
- Dispersión de luz
- en un cristal líquido nemático, 80
 - espectro de Brillouin en equilibrio, 85
 - espectro de Rayleigh en equilibrio, 85
 - espectro de Rayleigh fuera del equilibrio, ocasionado por un gradiente de temperatura uniforme y un campo gravitatorio constante, 124
 - espectro fuera del equilibrio, ocasionado por un gradiente de presión uniforme, 144
 - espectro típico en equilibrio, 85
 - geometrías de dispersión, 82
 - métodos de detección heterodinos y homodinos, 84
 - en un fluido simple
 - espectro de Rayleigh-Brillouin, 4
 - teoría general, 74
 - densidad espectral, 78
 - factor de estructura dinámico, 79
 - geometrías de dispersión, 76
 - métodos de detección homodinos y heterodinos, 77

Ecuación

- de Chapman-Kolmogorov, 55
- general de transferencia térmica, 41
- generalizada de Langevin, 56

Ecuaciones

- de balance y de conservación, 27
- de balance del director, 36
- de balance para la densidad de cantidad de movimiento, 29
- de conservación para la densidad de masa, 29
- de conservación para la densidad volumétrica de energía total, 31
- nematodinámicas, 48
- nematodinámicas linealizadas
 - fluctuantes, 64, 68
 - para las desviaciones de las variables, 58, 60

Energía

- interna, 20
 - densidad, 21
- libre de Helmholtz, 21
 - densidad, 21

Factor de estructura dinámico, 4, *véase* Dispersión de

- luz, teoría general
- de un nemático fuera del equilibrio debido a la presencia de un gradiente de presión uniforme, 141
- de un nemático fuera del equilibrio debido a la presencia de un gradiente de temperatura uniforme y un campo gravitatorio constante, 121

Fluctuaciones térmicas

- en equilibrio, 1
- fuera de equilibrio
 - amplitudes, 126

Flujos termodinámicos, 42

Fuerzas termodinámicas, 42

Función

- de disipación, *véase* Ecuación de balance para la densidad volumétrica de entropía
- de dispersión intermedia (o de van Hove), 132

Funciones

- de correlación dependientes del tiempo
 - de autocorrelación, 2
 - de correlación cruzada, 2

Gradiente

- de presión
 - debido a la presencia de un campo gravitatorio constante, 91
 - debido a la presencia de un flujo de Poiseuille, 136
- de temperatura efectivo, 92, 118
- de temperatura uniforme, 91

Hidrodinámica fluctuante, 2

- de cristales líquidos nemáticos, 7, 8, 58
- de Fox-Uhlenbeck, 8, 53
- de Landau-Lifshitz, 3, 70

Hipótesis

- de equilibrio termodinámico local, 1, 14, 20, 60
- de regresión de Onsager, 3, 56

Ley de Fourier para un nemático, 47

Modelo

- de un nemático fuera del equilibrio
 - en un estado estacionario producido por un gradiente de presión uniforme, 136
 - en un estado estacionario producido por un gradiente de temperatura uniforme y un campo gravitatorio, 91

Modos hidrodinámicos

- de un fluido simple, 4
- definición, 2, 28

- nemáticos longitudinales
 - acústicos, 107
 - visco-calóricos y del director, 108
- nemáticos transversales
 - de cizalla y del director, 113
- Número de Rayleigh, 108
 - cociente de Rayleigh, 108
 - valor crítico, 108
- Nematodinámica fluctuante, *véase* Hidrodinámica fluctuante de cristales líquidos nemáticos
- Proceso estocástico
 - estacionario, 54
 - gaussiano, 54
 - markoviano, 55
- Relación
 - de Doob, 55
 - de Euler, 21
 - de Siegert, 84
- Relaciones
 - de fluctuación-disipación, *véase* Teorema de fluctuación-disipación
 - recíprocas de Onsager, 43, 57
- Rompimiento de simetrías, 33
- Ruidos, 63
- Sistema de Rayleigh-Bénard, 7
 - inestabilidades, 91
- Sistemas puramente resistivos, 42
- Temperatura
 - a la que un sólido se funde en un nemático, 17
 - de aclaramiento de un nemático, 17, 33
- Teoría
 - de Fox-Uhlenbeck, 54
 - de Onsager-Machlup, 3, 57
 - hidrodinámica, 1
 - para un nemático
 - de Ericksen, Leslie y Parodi (ELP), 34
 - del grupo de Harvard, 34
- Teorema
 - de fluctuación-disipación, 3
 - forma general, 56
 - de Onsager, 43
- Teoremas
 - de fluctuación-disipación de un nemático, 67
- Transformada de Fourier, 100
- Variables nemáticas
 - con la misma dimensión, 103
 - longitudinales y transversales, 100
 - transformadas en Fourier espacialmente, 100