

27
ZEJ

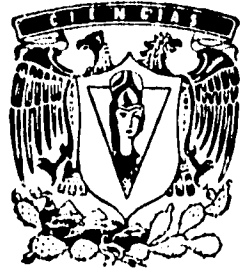


UNIVERSIDAD NACIONAL AUTONOMA
DE MEXICO

FACULTAD DE CIENCIAS

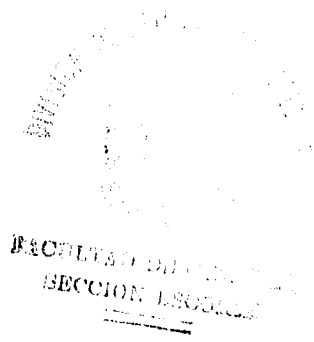
EFFECTOS DE RUIDO EXTERNO NO LINEAL SOBRE LA
BIRREFRIGENCIA DE CRISTALES LIQUIDOS NEMATICOS

T E S I S
QUE PARA OBTENER EL TITULO DE:
F I S I C O
P R E S E N T A :
JOSE ALBERTO OLIVARES LEONA



MEXICO, D. F.

MARZO DE 1995



FALLA DE ORIGEN

**-TESIS CON
FALLA DE ORIGEN**



Universidad Nacional
Autónoma de México

Dirección General de Bibliotecas de la UNAM

Biblioteca Central



UNAM – Dirección General de Bibliotecas
Tesis Digitales
Restricciones de uso

DERECHOS RESERVADOS ©
PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL

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

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



UNIVERSIDAD NACIONAL
AVANZANDO DE
MEXICO

M. EN C. VIRGINIA ABRIN BATULE
Jefe de la División de Estudios Profesionales
Facultad de Ciencias
Presente

Los abajo firmantes, comunicamos a Usted, que habiendo revisado el trabajo de Tesis que realiz(ó)ron el pasante(s) Olivares Lecona José Alberto

con número de cuenta 8100340-2 con el Título: Efectos de Ruido Externo No Lineal sobre la Birrefringencia de Cristales Líquidos Nemáticos

Otorgamos nuestro **Voto Aprobatorio** y consideramos que a la brevedad deberá presentar su Examen Profesional para obtener el título de FISICO

GRADO	NOMBRE(S)	APELLIDOS COMPLETOS	FIRMA
	Dr. Rosalfo Fernando	Rodríguez Zepeda	<i>[Signature]</i>
Director de Tesis	Dr. Rufino Díaz	Uribe	<i>[Signature]</i>
	Dr. Gustavo Martínez	Mekler	<i>[Signature]</i>
M. en C.	Eduardo Roa	Neri	<i>[Signature]</i>
Suplente	M. en C. Adrian Reyes	Cervantes	<i>[Signature]</i>
Suplente			

Este trabajo está dedicado a varias personas.

La primera obviamente es mi padre José Olivares Rivas,
de quien me siento orgulloso por él como persona y como hijo.

La segunda, más que obvio, es mi madre Ma. Elena Lecona Vda. de Olivares,
que, aunque yo no lo demuestre, su amor y su cariño correspondiéndole a mi
manera.

Las terceras son mis hermanas Silvia, Patricia y Jacquelin,
que en todo momento me apoyan y me cuidan.

A mi familia en general.
Que al menos todavía se interesan por mí.

A todos ellos gracias

Agradecimientos

Antes que todo quisiera agradecer a la *Fundación José Olivares*, el dinero facilitado para que pudiera sobrevivir desde hace mucho tiempo y el impulso que su espíritu me da para seguir adelante.

En segundo lugar a mi familia en toda la extensión por su constante apoyo.

En tercer lugar un agradecimiento más profundo al Dr. Rosalío Rodríguez, es obvio por que, pero especialmente por su enseñanzas, su apoyo y por su ∞ paciencia.

En cuarto lugar a los profesores: Dr. Rufino Díaz Uribe, Dr. Gustavo Martínez Mekler, Dr. Eduardo Roa Neri, y próximo Doctor, M. en C. Adrián Reyes Cervantes, que tuvieron la amabilidad y el tiempo de revisar y criticar éste trabajo. No acabando este agradecimiento aquí, ya que independientemente de este trabajo, en diferentes formas y en tiempos distintos han contribuido para que este primer paso se diera.

Un agradecimiento con mucho cariño a mis amigos Victor Gopar, Moisés Martínez por permitirme utilizar, tanto su cubículo como sus libros y su tiempo.

Al IFUNAM como institución que a pesar de todo me da albergue día y noche para poder prepararnos y sacar un mejor País.

Al Dr. Jorge Mondragón por permitirme ocupar un escritorio en el cubículo de Física Teórica cuando carecía de uno (Indavía)

Al SNI, aunque también al Dr. Rodríguez por el apoyo económico que me dio durante este periodo.

A Jatsive que se desvelo algunos días por ayudarme y enseñarme algo de ortografía, redacción y otras cosas.

A mis hermanas Silvia Nabora, Patricia la Chata y Jacquelin la Nena que me han cuidado, celado, reganado y me han hecho sentir que no me encuentro tan sólo como a veces pienso. En especial debo agradecer a la profesora Patricia las clase de burradas que no debo cometer en ortografía.

Obviamente también se encuentran dentro de mis agradecimientos mis cuashermanos: (El Michi) Miguel Ángel Castillo Mayen, (El Huevas) Eduardo Reyes Torres, (El Zorra) Luis Alberto Hernández Sánchez, (El Shot) Luis Alberto Figueróa Arredondo, (El Casco) Vázquez Augusto Elías, (The Gentleman) Mauricio López Mergold, (El Tollo) Alejandro Carrillo Tollo, (El Lobo) Ángel Padilla di Cerdeño, ¿por que? pues es obvio.

Finalmente quisiera agradecerle al pueblo en general que a través de la UNAM, sostiene un montón de ociosos del pensamiento (científicos) que van en pos de esa verdad llamada Dios.

Indice

INTRODUCCION	3
1 PROPIEDADES GENERALES DE CRISTALES LIQUIDOS	7
1.1 Compuestos Mesogénicos	7
1.2 Composición Química.	10
1.3 Clasificación	14
1.3.1 Nemáticos	15
1.3.2 Colestéricos.	16
1.3.3 Esméticos.	17
1.4 Descripción Hidrodinámica.	18
1.5 Energía de distorsión elástica	19
1.6 Condiciones de Frontera	21
1.7 Efectos de campos externos	22
1.7.1 Efectos de campo magnético estático	22
1.7.2 Efectos de campo eléctrico	24
1.8 Efecto Freedericksz estático.	25
1.9 Transición de Freedericksz Óptica	29
2 ECUACIONES NEMATODINAMICAS	34
2.1 Ecuaciones Nematodinámicas Deterministas.	34
2.1.1 Condición de equilibrio termodinámico.	35
2.1.2 Producción de entropía.	40
2.1.3 Relaciones fenomenológicas.	42
2.2 Nematodinámica Estocástica	44
3 RUIDO EXTERNO	49
3.1 Introducción.	49
3.2 Ruido externo lineal	51
3.2.1 Ecuación de Fokker-Planck para el caso lineal	51
3.3 Ruido Externo no lineal.	56
3.3.1 Ecuación de Fokker-Planck (EFP)	56

4 ECUACIONES NEMATODINAMICAS PARA UNA GEOMETRIA ESPECIFICA	62
4.1 Introducción	62
4.2 Modelo	63
4.3 Funcional de energía libre	68
4.4 Ecuaciones de amplitud	69
4.5 Ecuación de Fokker-Planck	73
4.6 Momentos de la distribución $P(n_{q_0}(t),t)$	75
5 BIRREFRINGENCIA INDUCIDA	77
5.1 Introducción	77
5.2 Birrefringencia en sólidos cristalinos	78
5.2.1 Efecto Kerr	80
5.3 Birrefringencia inducida en cristales líquidos nemáticos	81
5.4 Birrefringencia inducida para 5CB.	85
5.5 Resultados.	88
6 CONCLUSIONES	91
BIBLIOGRAFIA	95

INTRODUCCION

Existen diversos materiales para los cuales la interacción con campos electromagnéticos muy intensos inducen una respuesta no lineal del medio, al mismo tiempo el medio reacciona modificando los campos externos en una forma no lineal. Este tipo de procesos da lugar al campo de la *Optica No Lineal*. Este campo relativamente nuevo comienza en 1960 con el descubrimiento de materiales fotorefractivos en los cuales se observaron procesos altamente no lineales como la conjugación de fase, la biestabilidad y la generación de segundo armónico. Desde entonces el campo de la óptica no lineal ha crecido aceleradamente motivando su desarrollo la creación de láseres muy intensos con pulsos de duración muy cortos así como el descubrimiento de materiales cuyas propiedades ópticas no lineales son enormes. Estos procesos no lineales aparte de ser importantes desde el punto de vista fundamental, son de suma importancia debido a su gran potencial en aplicaciones tecnológicas

Entre los materiales novedosos que han sido utilizados para observar fenómenos ópticos no lineales en los últimos años, destacan los cristales líquidos. Estos materiales se caracterizan por ser "suaves", es decir, porque la generación de fenómenos no lineales se produce con campos ópticos muy pequeños en comparación con aquellos usados para producirlos en cristales sólidos¹.

Uno de los fenómenos básicos para la comprensión de las propiedades ópticas no lineales en cristales líquidos lo constituye la Transición de Freedericksz Óptica (TFO). Este fenómeno se presenta cuando un haz láser polarizado incide sobre una muestra de cristal líquido con sus moléculas anisotrópicas en un cierto estado de alineación

¹ Los valores típicos de las potencias de los láseres utilizados en un cristal líquido son de miliwatts, mientras que la potencia de los láseres utilizados para sólidos son del orden de megawatts

inicial². El láser ejercerá una torca sobre las moléculas del cristal líquido que tiende a orientarlas en la dirección del campo eléctrico, pero como el medio ejerce también torcas elásticas sobre las moléculas, se establece una competencia entre ambos tipos de torcas. Conforme la intensidad del láser aumenta el sistema adquiere cada vez más energía volviéndose más inestable. Si la intensidad del campo óptico sobrepasa un cierto valor crítico, entonces las torcas eléctricas vencen a las torcas elásticas y comienza el proceso de reorientación en la dirección del campo eléctrico, relajando a una configuración orientacional en la cual la mayoría de las moléculas se encuentran alineadas, en promedio, en la dirección del campo eléctrico. Así pues, la TFO se puede visualizar como un proceso de relajación, i.e. como un proceso irreversible, de un estado de equilibrio inicial inestable a un estado de equilibrio final. Debido a la anisotropía de las moléculas, los efectos de la reorientación tienen como consecuencia producir un cambio en diversas propiedades macroscópicas del material, como pueden ser la constante dieléctrica, la susceptibilidad magnética, etc..

Este fenómeno ha sido discutido extensamente en la literatura reciente y constituye uno de los efectos que colocan a los cristales líquidos en un lugar muy importante dentro de los nuevos materiales susceptibles de ser empleados en diversas aplicaciones tecnológicas. Sin embargo, en la mayoría de los estudios teóricos y experimentales que se han hecho, los efectos de las fluctuaciones, sean internas o externas, generalmente se desprecian; aunque existen algunos trabajos que consideran fluctuaciones internas como ruido térmico inherente al sistema. Ahora bien, existen algunos sistemas en donde las fluctuaciones (internas) no son pequeñas y son esenciales para describir su dinámica; por ejemplo, en la vecindad de estados termodinámicos inestables o más generalmente, en estados fuera de equilibrio. Así pues, para poder estudiar esta clase de sistemas, es necesario hacerlo en términos de una descripción estocástica, que además tiene otras ventajas como son el poder calcular funciones de correlación en términos de las cuales se expresan diversas propiedades de transporte, así como propiedades dinámicas (p. ej. tiempos de respuesta). En esto reside la motivación de este trabajo. Más específicamente, su objetivo principal es el estudio de la reori-

²Impuesto por las condiciones de frontera

entación de las moléculas que componen a un cristal líquido nemático causada por un haz láser. En particular, el trabajo se enfoca al cálculo de la birrefringencia inducida en el nemático por las fluctuaciones externas en la amplitud del campo óptico aplicado.

Para este fin, se construye un modelo de reorientación que toma en cuenta lo anterior. Una de las características de este modelo es que las fluctuaciones externas aparecen en la dinámica de la reorientación en forma cuadrática (ruido no lineal). Este tampoco es un problema muy común, ya que generalmente se ha estudiado el problema de ruido externo lineal y sólo en pocos casos se han desarrollado técnicas para el caso no lineal. Así, en este trabajo se estudiarán los efectos del ruido externo no lineal en la reorientación y se obtendrá una expresión analítica para la birrefringencia inducida por dichas fluctuaciones para un cristal líquido nemático. Además, debido a que la reorientación de las moléculas induce un flujo hidrodinámico en el sistema, también los efectos de flujo se tomarán en cuenta explícitamente en nuestra descripción. Este hecho usualmente no se considera en la mayoría de los trabajos en la literatura y, como veremos, afecta significativamente al proceso de reorientación.

El punto de partida para calcular la birrefringencia son las ecuaciones nematodinámicas, las cuales son bien conocidas en la literatura [1], [8],[9],[10] y se obtienen considerando al cristal líquido como un medio continuo. Estas ecuaciones se escriben para una geometría específica y bajo ciertas aproximaciones, se reducen a ecuaciones de amplitud de las variables relevantes, en las que el campo externo aparecerá en forma cuadrática y aditiva. Una vez que se han obtenido estas ecuaciones se introducen las fluctuaciones en la amplitud del campo externo, obteniéndose ecuaciones estocásticas para la amplitud de Fourier de las variables relevantes.

El tratamiento para dichas ecuaciones estocásticas se basa en el método desarrollado por San Miguel y Sagués [42], quienes construyen y asocian una ecuación de Fokker-Planck para la densidad de probabilidad de la amplitud de Fourier de las componentes del campo director a dichas ecuaciones estocásticas y con ésta se calculan los momentos de esta función de distribución en el límite estacionario. Finalmente, utilizando estos se calcula la birrefringencia inducida por el ruido externo.

Cabe señalar que el estado estacionario que se considerará no coincide con el

estado final del proceso de reorientación, debido a que las aproximaciones empleadas en éste modelo sólo permiten describir las primeras etapas de la reorientación ya que la descripción de todo el proceso de reorientación implica utilizar las ecuaciones nematodinámicas que de entrada son altamente no lineales.

Para este fin el trabajo se ha organizado de la siguiente manera. En el capítulo 1 se da un breve resumen de las propiedades básicas de los cristales líquidos (composición química, clasificación e interacción con agentes externos) y se discute el efecto Freedericksz.

Posteriormente, en el capítulo 2 se describe la deducción de las ecuaciones nematodinámicas deterministas obtenidas por de Gennes y las ecuaciones nematodinámicas estocásticas desarrolladas por San Miguel y Sagnés.

En el capítulo 3, se describen las técnicas desarrolladas por San Miguel y Sancho para el tratamiento de problemas con ruido externo lineal y no lineal.

El modelo y la geometría particular que se adopta para el cálculo de la birrefringencia se describen en el capítulo 4. En este capítulo se emplean las ecuaciones obtenidas en el capítulo 2, y se aplican las técnicas descritas en el capítulo 3 para obtener los momentos de la función distribución necesarios para calcular la birrefringencia del nemático.

En el capítulo 5 se obtiene la expresión para la birrefringencia, la cual se grafica utilizando los parámetros de un nemático específico, 5CB. En la última sección de este capítulo se discuten críticamente los resultados.

Finalmente, en las conclusiones, se discuten las limitaciones y alcances de este trabajo.

Capítulo 1

PROPIEDADES GENERALES DE CRISTALES LIQUIDOS

En este capítulo se describen las características generales de los cristales líquidos, composición química, clasificación y los efectos que sobre éstos producen agentes externos como son las fronteras que lo confinan y diversos tipos de campos externos, eléctricos y magnéticos estáticos, así como campos ópticos. Finalmente, se describirá brevemente el efecto de reorientación producido por estos campos sobre las moléculas del cristal líquido.

1.1 Compuestos Mesogénicos

Para entender el concepto de cristal líquido, es necesario hacer referencia a algunos aspectos relativos a la estructura microscópica de los sólidos cristalinos y de los líquidos isotrópicos.

En un cristal sólido compuesto por moléculas isotrópicas, los centros de masa de las moléculas están anclados a un arreglo periódico tridimensional presentando orden posicional a largo alcance. Esto se manifiesta en el patrón de difracción de rayos X que presenta picos de intensidad de reflexión bien definidos (fig 1.1a). Por el contrario, en el líquido isotrópico, los centros de masa de las moléculas están distribuidos aleatoriamente, por lo que sólo existe orden posicional a corto alcance y en consecuencia su

patrón de difracción no presenta máximos de intensidad (fig.11b).

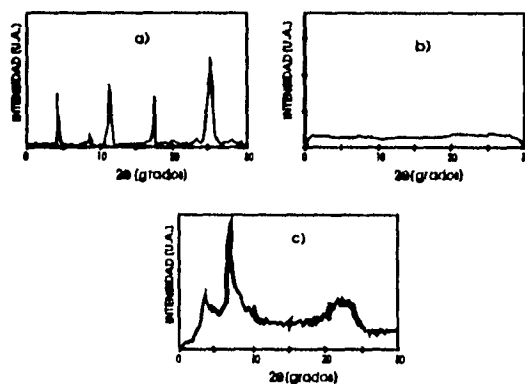


Figura 1.1: Patrón de difracción de rayos X. a) Sólido cristalino, b) Líquido isotrópico, c) Cristal líquido esméctico fase A. Los picos de intensidad que aparecen en esta última figura indican que las moléculas no se encuentran distribuidas aleatoriamente.

Si los sólidos cristalinos están compuestos por moléculas anisotrópicas, entonces la estructura molecular presenta dos tipos de orden a largo alcance: posicional y orientacional.

Para estas sustancias, ambos tipos de orden desaparecen en el punto de fusión de la transición sólido cristalino-líquido isotrópico. Sin embargo, existen algunos compuestos orgánicos que presentan fases intermedias en las que el orden posicional permanece mientras que el orden orientacional se reduce o desaparece; cuando esto ocurre éstas sustancias reciben el nombre de *plásticos cristalinos*. En el caso inverso, cuando el orden orientacional se conserva y el orden posicional se reduce o desaparece, entonces las sustancias reciben el nombre de *cristales líquidos* o *compuestos mesogénicos* y las fases intermedias son conocidas como *mesofases* o *fases líquido-cristalinas* [1][2][3]

Así pues, los compuestos mesogénicos son sustancias orgánicas constituidas por moléculas altamente anisotrópicas, en donde la transición del estado sólido al estado

líquido, pasa por una o más fases termodinámicas bien diferenciadas, presentando orden orientacional a largo alcance, así como diversos grados de orden posicional el cual dependerá de las características químicas de las moléculas [3] (fig 1.2).

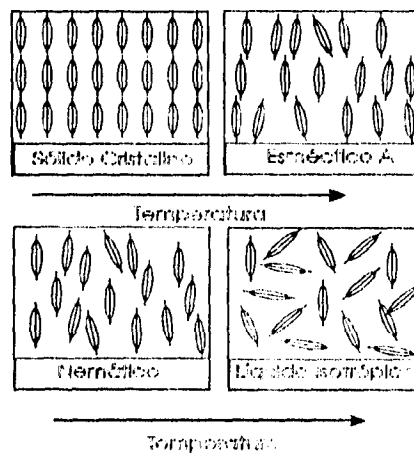


Figura 1.2: Diversas mesofases en cristales líquidos termotrópicos. Conforme la temperatura aumenta el orden posicional desaparece dando lugar a una o más mesofases. Aquí se muestra la fase esméctica A y la nemática. Nótese que la fase esméctica presenta un grado mayor de orden posicional que la nemática

Las propiedades mecánicas de estas mesofases son semejantes a las de un líquido convencional debido a que los centros de masa de las moléculas no están fijos espacialmente y por tanto fluyen ¹. Por otro lado, al existir orden orientacional de largo alcance, estas sustancias tienen propiedades anisotrópicas semejantes a aquéllas de cristales sólidos como la anisotropía en la constante dieléctrica y en la susceptibilidad magnética, manifestándose principalmente en propiedades ópticas como la birrefringencia [1][3][5].

¹La fluidez dependerá del grado de orden posicional que presente cada mesofase

1.2 Composición Química.

Las unidades estructurales que constituyen un cristal líquido son moléculas geométricamente anisotrópicas con una parte rígida polarizable. La forma geométrica común de éstas, es alargada como una "varilla" (calamíticas) o planas en forma de discos (discóticas) [4] (fig.1.3) .

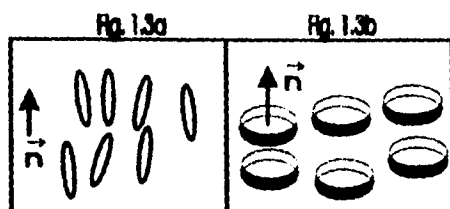


Figura 1.3: Geometría de las moléculas mesogénicas. a) Calamíticas, b) Discóticas. El vector \vec{n} indica la orientación promedio de los ejes largos de las moléculas

Estas unidades pueden constituirse por moléculas orgánicas pequeñas o largas, así como por estructuras moleculares complejas. Las *Moléculas orgánicas pequeñas* son calamíticas, sus dimensiones son de unos 20 Å de longitud por 5 Å de ancho. Ejemplos típicos son: el azoxianisol-p (PAA) y la butilnilina-p (MBBA) (fig.1.9). Las *Moléculas largas* existen en forma natural (DNA, virus mosaico del tabaco) o se obtienen artificialmente por medio de fibras plásticas flotando en agua, así como polipéptidos sintéticos disueltos en ciertos solventes. Las dimensiones para estas moléculas que también son calamíticas pueden variar desde unos 300 Å de largo por 20 Å de ancho para los polipéptidos sintéticos, hasta 3000 Å de largo por 200 Å de ancho para el virus mosaico del tabaco. También dan lugar a mesofases las *estructuras complejas de moléculas*, como los sistemas de agua-jabón, en donde los aniones alifáticos ($C H_3 - [C H_2]_n - C O_2^-$) y iones positivos ($N a^+$, K^+ , $N H_4^+$) se ordenan formando cadenas². Cada cadena en solución, no constituye por sí misma

²La parte polar ($C O_2^-$) tiende a estar en contacto con el agua, mientras que la parte apolar la evita

un cristal líquido, sin embargo cuando se forman cumulos de cadenas, entonces estos pueden adoptar la forma de una "varilla" o de un "disco" constituyendo así las unidades estructurales que darán lugar al compuesto mesogénico (fig. 1.4).

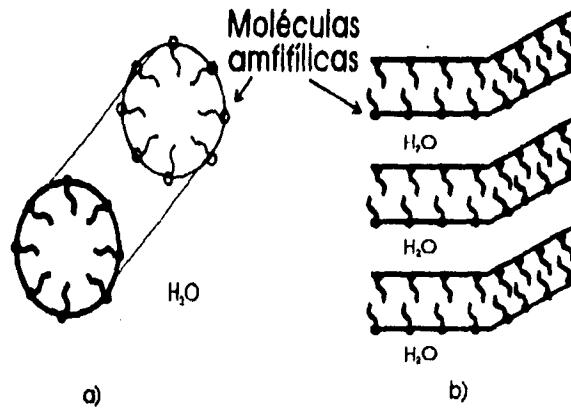


Figura 1.4: Ejemplos típicos de agregados moleculares complejos que dan lugar a compuestos mesogénicos. Estos constituyen a) columnas o b) capas.

En este trabajo sólo se considerarán cristales líquidos compuestos por moléculas orgánicas pequeñas y que presentan una mesofase específica, la fase nemática, que se discute con más detalle en la siguiente sección.

Así, las moléculas sobre las que se hará referencia están descritas por la fórmula genérica de la fig 1.5.

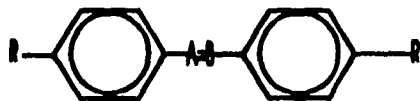


Figura 1.5: Fórmula genérica de los compuestos mesogénicos. Las características principales de esta son: Estructuras cíclicas, como anillos de benceno. Grupos puente $A=B$ y cadenas terminales R y R'

La características químicas principales de estas moléculas son: presencia de estructuras cíclicas como anillos de benceno o heterocíclicas, en donde se encuentra la parte rígida polarizable de la molécula, ejemplo de ellas se presentan en la figura 1.6.

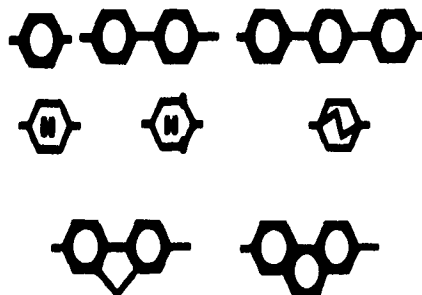


Figura 1.6: Ejemplos de diversas estructuras cíclicas

Estas estructuras están unidas por grupos puente A,B, como los que se muestran en la figura 1.7.

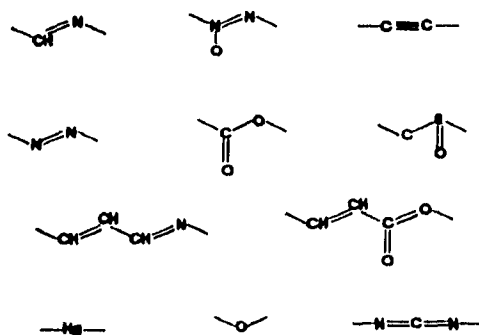


Figura 1.7: Diversos grupos puente

Además, existen cadenas alifáticas o grupos rígidos (-CN) terminales R y R' asociados a cada estructura.

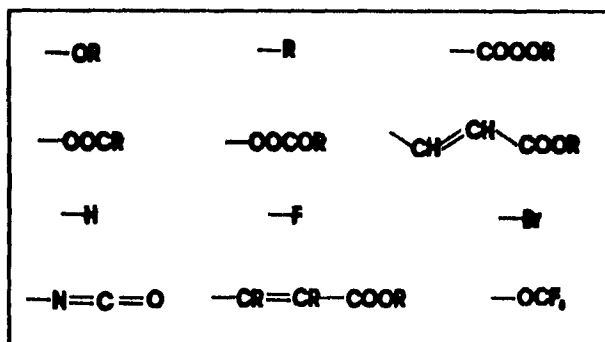


Figura 1.8: Grupos terminales. R y R' son cadenas alquilas

El tipo de mesofase está determinada por el número de grupos que cada cadena terminal R,R' contenga. Por ejemplo, si las cadenas están constituidas por un grupo (cadenas "cortas"), entonces la mesofase se caracterizará por presentar un grado menor de orden posicional (fase nemática). Mientras mayor sea el número componentes de la cadena (cadenas "largas") las mesofases serán cada vez más ordenadas (esméticas), pudiéndose dar el caso de compuestos que contienen cadenas con un número intermedio de componentes y que presentan ambos tipos de mesofases (esmética y nemática) [3].

Cabe señalar que, aunque la estructura molecular en general no es plana y existe un ángulo entre los anillos de benceno, es común considerarla plana de tal forma que el eje largo de las moléculas esté contenido en el plano de los anillos y facilite su descripción.

Para finalizar ésta sección se presentan algunos ejemplos típicos de moléculas mesogénicas [6]:

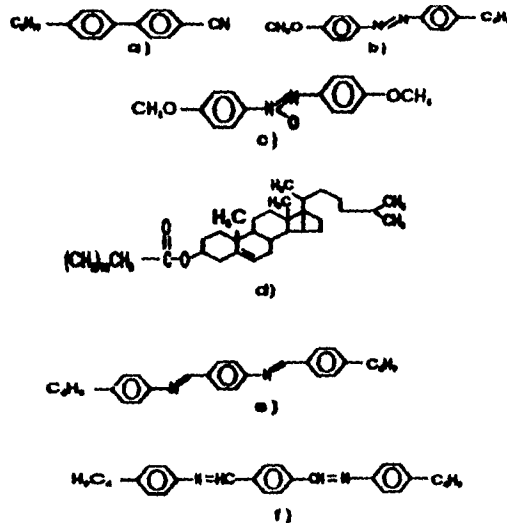


Figura 1.9: Ejemplos típicos de moléculas mesogénicas. Nemáticos a) 5CB, b) MBBA, c) PAA. Colestérico d) Benzoato de Colesteril. Esméctico f) TBBA (Tereftalideno-bis-(butilanilina-p))

1.3 Clasificación

Existen dos grupos principales de cristales líquidos que se caracterizan por los parámetros a través de los cuales se inducen las transiciones de una fase a otra. Estos son:

Cristales líquidos litrópicos formados por moléculas de alto peso molecular (p. ej. compuestos anfifílicos, DNA), y cuya transición se induce por cambios en la concentración.

Cristales líquidos termotrópicos, constituidos por moléculas de bajo peso molecular y en donde la transición se efectúa mediante cambios en la temperatura.

A su vez los cristales líquidos termotrópicos se clasifican estructuralmente [7] en tres mesofases principales: *Nemáticos*, *Colestéricos* y *Esmécticos*.

1.3.1 Nemáticos

En la siguiente figura se representa esquemáticamente el orden estructural que presentan los cristales líquidos nemáticos.

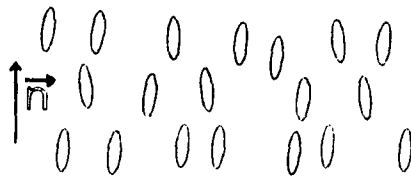


Figura 1.10: Arreglo estructural de las moléculas en un nemático. El vector \vec{n} indica la dirección preferencial de alineación de las moléculas

Como se puede apreciar en la figura anterior las moléculas de esta mesofase se encuentran distribuidas aleatoriamente como en un líquido isotrópico, por lo que no existe orden posicional a largo alcance³. Esto trae como consecuencia que las propiedades de transporte como la viscosidad sea parecida a la de un líquido isotrópico ($\sim 10^{-2}$ poise).

Ya que los ejes largos de las moléculas son mutuamente paralelos, fijan una dirección macroscópica preferencial. Dicha dirección se describe por un vector unitario \vec{n} que indica la orientación promedio de alineación de las moléculas.

La polarización a lo largo de \vec{n} es nula, debido a que el número de moléculas con momento dipolar permanente en una dirección es igual al número de moléculas con momento dipolar permanente en dirección opuesta, por lo que los estados \vec{n} y $-\vec{n}$ son indistinguibles.

Las características ópticas de esta mesofase corresponden a las de un medio uniaxial con eje óptico paralelo al vector \vec{n} , alrededor del cual existe simetría rotacional. Esto se refleja notablemente en las propiedades ópticas como la birrefringencia.

Cabe señalar que el tipo de moléculas que constituyen esta fase generalmente

³En comparación con las otras dos mesofases, esta es la más desordenada.

son ópticamente inactivas y tienen simetría a espejo (aquirales), aunque el nemático puede estar constituido por un sistema de moléculas ópticamente activas (moléculas quirales) en donde se tiene la misma cantidad de moléculas izquierdas y derechas.

1.3.2 Colestéricos.

La mesofase colestérica es un caso particular de la fase nemática formada por moléculas ópticamente activas en las que existe un número mayor de moléculas izquierdas o derechas (quirales).

El orden orientacional se preserva, pero ahora, \vec{n} varía espacialmente de tal forma que adquiere una estructura helicoidal.

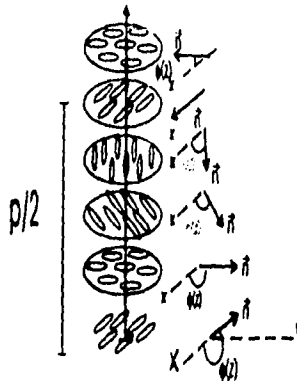


Figura 1.11: Arreglo estructural de las moléculas en la fase colestérica. ϕ es el ángulo que forma el vector director con el eje x , p es el "paso" de la hélice.

Para esta conformación cada plano perpendicular al eje de la hélice contiene moléculas que presentan el mismo orden orientacional y posicional que la fase nemática, pero la dirección preferencial rota ligeramente en los planos adyacentes. Para este caso el vector director \vec{n} se describe en términos del ángulo de rotación ϕ , que es función de la distancia sobre el eje de la hélice. Al tomar el eje de la hélice a lo largo

del eje z , \vec{n} se escribe como

$$n_x = \cos\phi, n_y = \sin\phi, n_z = 0, \text{ con } \phi = tz + cte.$$

La estructura helicoidal es entonces periódica a lo largo del eje de la hélice. Si p es la distancia en la que \vec{n} describe una rotación completa, entonces el período es $\frac{p}{2}$, debido a que los estados \vec{n} y $-\vec{n}$ son equivalentes e indistinguibles. A p se le conoce como el *paso* de la hélice.

Esta estructura helicoidal da lugar a fenómenos ópticos bastante interesantes, por ejemplo, la actividad óptica que presentan los colestéricos. Fenómeno en el que el poder rotatorio es miles de veces mayor que el de las sustancias ópticamente activas ordinarias (glucosa). Además, el paso de la hélice puede variar por la acción de agentes externos como la temperatura o la presión. Esto se manifiesta a simple vista ya que el paso es del orden de la longitud de onda en el visible, por lo que éstas variaciones producen cambios en la coloración o en la textura del cristal líquido [1].

1.3.3 Esméticos.

Esta mesofase es la más ordenada de todas. Se caracteriza por presentar al menos orden posicional en una dimensión, por lo que las moléculas forman capas bidimensionales que pueden deslizarse una sobre la otra y dentro de las cuales el orden posicional de las moléculas puede ser nulo como en el caso de los nemáticos (fase A y C) o inclusive pueden ordenarse en estructuras hexagonales (fase B).

El espaciamiento d entre cada capa está bien definido y puede obtenerse a partir del espectro de difracción de rayos X. La dirección de orientación de las moléculas puede ser perpendicular al plano de las capas o en su defecto formar un cierto ángulo con las capas. En el primer caso se tiene un compuesto uniaxial (fase A) y para el segundo se tendrá un medio con características de medio biaxial (fase C), aunque la desviación respecto a la uniaxialidad es, en general, pequeña.

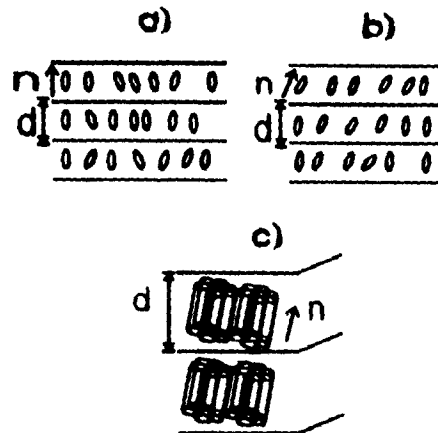


Figura 1.12: Arreglo estructural de las moléculas en el esméctico. a) Fase A, b) Fase C. c) Fase B. En esta última las moléculas están ordenadas en cada capa en una estructura hexagonal.

1.4 Descripción Hidrodinámica.

Existen diversos niveles de descripción teórica de los cristales líquidos nemáticos [1][8][9][11][12]. En particular, esta descripción puede hacerse fenomenológicamente, como lo hace de Gennes [1], o a un nivel microscópico utilizando el formalismo de Maier-Saupe [11].

En este trabajo se adopta el formalismo de de Gennes, en el que se considera al cristal líquido como un medio continuo. En efecto, la conformación ideal de un nemático, esto es el estado de mínima energía, supone que todas las moléculas están alineadas a lo largo de una cierta dirección común \vec{n} , la cual no presenta variaciones espaciales. Sin embargo, esta configuración no es compatible con las constricciones que imponen agentes externos como las fronteras que confinan al nemático o los campos externos que interactúan con él, ya que estos producen distorsiones en el estado de alineación de las moléculas elevando la energía por lo que \vec{n} presenta

variaciones espaciales, convirtiéndose en una función de punto.

Las observaciones experimentales muestran que la magnitud de las distorsiones ($l > 1 \mu\text{m}$) son mucho mayores que las dimensiones moleculares ($a \sim 20 \text{ \AA}$), por lo que es posible describir al sistema como un medio continuo en el cual se ignoran los detalles de la estructura molecular. Así, las distorsiones se describen por medio de un campo vectorial $\vec{n}(\vec{r})$, de magnitud unitaria, $n^2 = 1$, que describe la orientación promedio de los ejes largos de las moléculas que constituyen al cristal líquido. Si, además, se supone que las variaciones de \vec{n} son pequeñas en una escala macroscópica y lentas comparadas con tiempos moleculares típicos, entonces $\vec{n}(\vec{r}, t)$ será una variable hidrodinámica local.

De esta forma, la deducción de las ecuaciones hidrodinámicas del cristal líquido puede realizarse a partir de la termodinámica irreversible lineal, en donde las distorsiones inducidas por las fronteras o por los campos externos se visualizan como procesos irreversibles e isotérmicos lineales.

Con la interpretación anterior y bajo la hipótesis de equilibrio local, es posible construir un potencial termodinámico, como la energía libre de Helmholtz, a partir de la cual se extrae la información dinámica.

1.5 Energía de distorsión elástica

Como primer paso, es necesario obtener la forma explícita de la funcional de energía libre de Helmholtz para las distorsiones elásticas que presenta el nemático.

Si se considera un sistema ligeramente distorsionado ($a/l \ll 1$), en el cual el estado de distorsión local está descrito por $\vec{n}(\vec{r})$ y sus gradientes, entonces bajo las siguientes suposiciones es posible obtener la forma explícita de la energía libre de Helmholtz asociada F_d :

1. Las variaciones de \vec{n} son lentas a escala molecular, i.e., $a\nabla\vec{n} \ll 1$, donde a es una dimensión molecular típica.
2. Las únicas fuerzas intermoleculares de importancia son de corto alcance.

Con estas hipótesis se desarrolla a la energía libre de distorsión F_d como una serie de potencias en los gradientes de $\vec{n}(\vec{r})$ en la cual sólo se considerarán los términos

de orden dos⁴. Para construir dicho desarrollo es necesario considerar que:

(1) F_d debe ser par en \vec{n} , ya que los estados \vec{n} y $-\vec{n}$ son indistinguibles.

(2) Los términos lineales en $\nabla \vec{n}$ no se consideran, ya que F_d debe ser invariante ante rotaciones de cuerpo rígido.

(3) Los términos en F_d que tienen la forma $\text{div} \vec{n}$, se descartan ya que estos términos contribuyen

a la densidad de energía superficial cuando se integran y en este trabajo sólo se consideran propiedades volumétricas.

Por tanto F_d sólo contendrá términos del orden de $(\nabla \vec{n})^2$, siendo $(\text{div} \vec{n})$, $(\vec{n} \cdot \text{rot} \vec{n})$, $(\vec{n} \times \text{rot} \vec{n})$ los únicos términos que satisfacen las condiciones mencionadas arriba. De esta forma la densidad de energía de distorsión elástica, también llamada energía de Frank [13], es

$$F_d = \int_V f_d d\vec{r}, \quad (1.1)$$

donde V es el volumen ocupado por el nemático y f_d está dada por

$$f_d = \frac{1}{2} K_1 (\text{div} \vec{n})^2 + \frac{1}{2} K_2 (\vec{n} \cdot \text{rot} \vec{n})^2 + \frac{1}{2} (\vec{n} \times \text{rot} \vec{n})^2. \quad (1.2)$$

Esta es la fórmula fundamental en la teoría del continuo para un nemático. Las constantes elásticas K_i son positivas y con un valor del orden de 10^{-7} dinas. Cada término en la ecuación anterior está asociada a los tres tipos fundamentales de distorsiones elásticas en un cristal líquido, a saber,

En muchos casos es usual hacer la aproximación de constantes iguales,

$$K_1 = K_2 = K_3 = K \quad (1.3)$$

de tal forma que la ec. (1.2) se reduce entonces a

$$f_d = \frac{1}{2} K \{ (\text{div} \vec{n})^2 + (\text{rot} \vec{n})^2 \} \quad (1.4)$$

⁴ Los términos de orden mayor a dos no son considerados debido a que estos términos van como potencia de $(\nabla \vec{n})^2$.

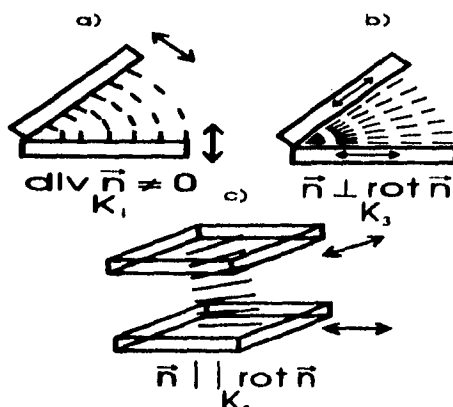


Figura 1.13: Deformaciones principales en un nemático. a) Bend b) Splay c) Twist. Las flechas en las placas indican la dirección del "eje fácil", esto es, la dirección que impone una orientación sobre las moléculas del nemático. Esto se vera más adelante

Puesto que en el próximo capítulo se discutirán las condiciones bajo las cuales se alcanza el equilibrio termodinámico, sólo se comentarán algunas características de la interacción con las fronteras.

1.6 Condiciones de Frontera

En la deducción de la expresión de la energía libre de distorsión se han despreciado las contribuciones a la energía debidas a la interacción con superficies sólidas, ya que en la mayoría de los casos las fuerzas superficiales son tan grandes que imponen una dirección bien definida al campo director \vec{n} en la superficie. Esta condición se conoce como *anclaje fuerte*. La condición implica que la densidad de energía superficial no cambia en las fronteras y por tanto es suficiente con minimizar la energía volumétrica si se desean calcular las condiciones de equilibrio termodinámico.

Existen técnicas experimentales a través de las cuales se puede imponer la dirección de \vec{n} en la frontera ("eje fácil"); ya sea por el pulimiento en una dirección

dada de una placa de vidrio, en donde las moléculas se alinean en esta dirección (*configuración planar*) o por tratamiento químico de la superficie, de tal forma que el eje largo de las moléculas sea perpendicular a la superficie (*configuración homeotrópica*) o forme un cierto ángulo con ella.

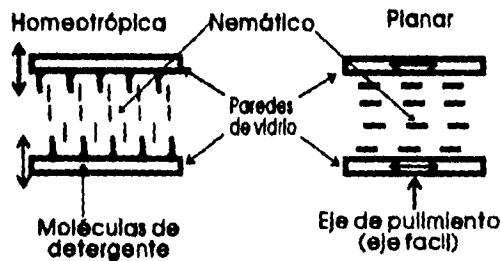


Figura 1.14: Dos tipos de configuraciones usuales en nemáticos dentro de placas de vidrio. a) Homeotrópica, en la cual la dirección preferencial es perpendicular a las placas y se impone por medio de tratamientos químicos. b) Planar. Para esta la dirección preferencial se impone puliendo la placa en una sola dirección.

1.7 Efectos de campos externos

1.7.1 Efectos de campo magnético estático

Las moléculas orgánicas que constituyen al nemático son diamagnéticas, siendo el diamagnetismo más intenso debido a los anillos de benceno de la molécula. Estos generan una corriente al sentir la presencia de un campo magnético \vec{H} normal a su plano, de tal forma que el flujo magnético a través de ellos se reduzca, lo que implica que la energía del sistema aumenta. Por otro lado, si \vec{H} es paralelo a los anillos, no existe flujo alguno a través de ellos y, por tanto, no se induce ninguna corriente, por lo que la energía del sistema se mantiene inalterada.

El efecto del campo magnético sobre las moléculas de cristal líquido es inducir una torca, de tal forma que las moléculas tiendan a alinearse en una dirección en la

cual \vec{H} esté contenido en el plano de los anillos y por tanto la energía sea mínima.

Las moléculas típicas de nemático contienen al vector director \vec{n} en el plano de los anillos, minimizándose la energía cuando \vec{n} , que coincide con el eje óptico, es paralelo al campo \vec{H} .

La magnetización \vec{M} inducida por el campo magnético estático \vec{H} , para medios anisotrópicos está dada por

$$\vec{M} = \overleftrightarrow{\chi} \vec{H}$$

donde $\overleftrightarrow{\chi}$ es el tensor de susceptibilidad magnética. En el caso particular de un nemático (medio uniaxial) el tensor está dado por:

$$\chi_{ij} = \chi_{\perp} \delta_{ij} + \chi_a (n_i n_j - \frac{1}{3} \delta_{ij})$$

en donde es $\chi_a = \chi_{\parallel} - \chi_{\perp}$ es la susceptibilidad magnética anisotrópica, que generalmente es positiva; χ_{\parallel} y χ_{\perp} son las susceptibilidades magnéticas paralela y perpendicular a \vec{n} , respectivamente.

Así la magnetización inducida en el nemático está dada por:

$$\vec{M} = \chi_{\perp} \vec{H} + \chi_a (\vec{n} \cdot \vec{H}) \vec{n}, \quad (1.5)$$

La contribución a la densidad de energía libre de Helmholtz debido al acoplamiento entre \vec{n} y un campo magnético estático \vec{H} es entonces,

$$f_H = - \int_0^H \vec{M} \cdot d\vec{H} = -\frac{1}{2} \chi_{\perp} H^2 - \frac{1}{2} \chi_a (\vec{n} \cdot \vec{H})^2. \quad (1.6)$$

El primer término es independiente de la orientación y por tanto se omitirá. Entonces la contribución a la energía libre de Helmholtz está dada por

$$F_H = -\frac{1}{2} \int_V d\vec{r} \chi_a (\vec{n} \cdot \vec{H})^2. \quad (1.7)$$

Nótese que para $\chi_a > 0$ la energía se minimiza cuando \vec{n} es colineal a \vec{H} .

Finalmente la expresión para la torca magnética (por cm^3) ejercida sobre el nemático es:

$$\vec{\Gamma}_H = \vec{M} \times \vec{H} = \chi_a (\vec{n} \cdot \vec{H}) \vec{n} \times \vec{H}. \quad (1.8)$$

1.7.2 Efectos de campo eléctrico

Si se considera el caso de nemáticos *aislantes*, entonces el acoplamiento del nemático con el campo eléctrico estático involucra dos procesos diferentes: uno es la anisotropía de la constante dieléctrica con consecuencias similares a las estudiadas por el campo magnético, y el otro corresponde a la polarización dieléctrica inducida por distorsiones elásticas. Sólo se considerará el primer caso.

La relación entre el vector desplazamiento \vec{D} y el campo \vec{E} para medios anisotrópicos uniaxiales, está dada en forma análoga a la ec.(1.5), esto es,

$$\vec{D} = \epsilon_{\perp} \vec{E} + \epsilon_a (\vec{n} \cdot \vec{E}) \vec{n}. \quad (1.9)$$

En este caso, $\epsilon_a = \epsilon_{\parallel} - \epsilon_{\perp}$ es la anisotropía dieléctrica que puede ser positiva o negativa, dependiendo de la estructura química de las moléculas; ϵ_{\parallel} y ϵ_{\perp} son, respectivamente, las susceptibilidades dieléctricas paralela y perpendicular al eje del nemático. Por ejemplo, si cada molécula tiene su momento dipolar permanente paralelo a su eje largo, el dipolo se orienta en la dirección de \vec{E} , para éste caso tenemos que $\epsilon_a > 0$. Por otro lado, si el momento dipolar es normal al eje largo de las moléculas tenemos que $\epsilon_a < 0$ y \vec{n} se orienta perpendicularmente al campo \vec{E} .

La contribución eléctrica a la densidad de energía libre se obtiene a partir de la ecuación anterior, es decir,

$$f_e = -\frac{1}{4\pi} \int_0^E \vec{D} \cdot d\vec{E} = -\frac{\epsilon_{\perp}}{8\pi} E^2 - \frac{\epsilon_a}{8\pi} (\vec{n} \cdot \vec{E})^2. \quad (1.10)$$

El primer término de esta ecuación no es de interés ya que no acopla al campo con el director, el segundo muestra que \vec{n} se alinea con \vec{E} si $\epsilon_a > 0$ ó perpendicularmente si $\epsilon_a < 0$.

1.8 Efecto Fredericksz estático.

Hasta ahora sólo se ha considerado las interacciones de las fronteras y de los campos externos por separado. En lo que resta de este capítulo se discute el fenómeno de reorientación debido a un campo externo, considerando además los efectos que producen las fronteras, esto es la *transición de Fredericksz estática* [1].

Considérese una muestra de nemático con ϵ_a positiva entre dos placas dieléctricas transparentes separadas una distancia d . Las condiciones de frontera son de *anclaje fuerte* y sin pérdida de generalidad se toma una configuración inicial planar (fig. 1.15a), por lo que el campo director \vec{n}^0 sólo tiene componentes en x y y . Para simplificar más se considera que las constantes elásticas son iguales (ec.(1.3)).

Cuando la muestra de nemático se coloca en un campo eléctrico homogéneo y estático \vec{E} perpendicular a las placas, entonces el campo ejercerá una torca sobre las moléculas de nemático, dada por

$$\vec{\Gamma}_e = \epsilon_a (\vec{E} \cdot \vec{n}) \vec{n} \times \vec{E}, \quad (1.11)$$

Si la intensidad de dicho campo es menor que un cierto valor crítico [1] E_c ;

$$E_c = \frac{\pi}{d} \sqrt{\frac{K}{\epsilon_a}}, \quad (1.12)$$

entonces el efecto de las fuerzas elásticas originadas por las fronteras predomina. A medida que la intensidad del campo aumenta la torca eléctrica que experimentan las moléculas será comparable con las torcas elásticas estableciéndose una competencia entre ambas torcas y elevando la energía del sistema, de tal forma que el sistema se vuelve cada vez más inestable. Cuando \vec{E} alcanza el valor crítico E_c , las moléculas más alejadas de las placas se orientan de tal forma que \vec{n} esté alineado en la dirección de \vec{E} , por lo que el sistema relaja cayendo a un nuevo estado estable en donde la energía del sistema es mínima. Cabe recalcar que el sistema cae a un nuevo estado termodinámico estable en el que se tendrá una nueva configuración y que permanece en él, aún cuando el campo externo vuelva a ser nulo. Por esta razón, a este efecto se le conoce como Transición de Fredericksz estática⁵.

⁵Cabe aclarar que esta no es una transición de fase en el sentido termodinámico;

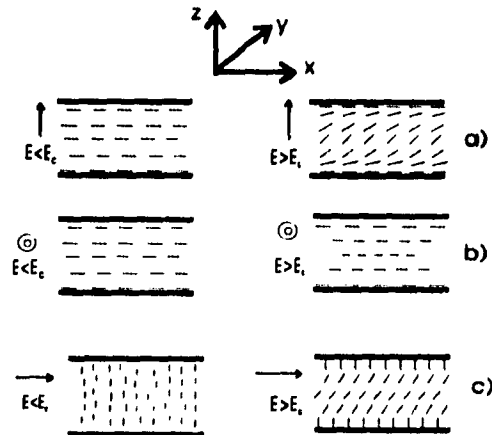


Figura 1.15: Transición de Freedericksz estática. Se muestran tres posibles geometrías para producir la reorientación.

Se ha definido una cantidad conocida como *longitud de coherencia* ξ que mide, a partir de las placas, la extensión de la región de transición entre la configuración inicial de \vec{n}^i y la configuración final \vec{n}^f donde \vec{n}^f se encuentra completamente orientado en la dirección de \vec{E} (fig. 1.16).

Es posible mostrar que la longitud de coherencia es inversamente proporcional al campo y directamente proporcional a la raíz cuadrada de las constantes elásticas asociadas a cada una de las deformaciones principales [1].

Así, la reorientación de las moléculas de un cristal líquido por un campo eléctrico o magnético produce distorsiones en la configuración inicial modificando las propiedades macroscópicas como la constante dieléctrica. Estos cambios en la constante dieléctrica ϵ del nemático pueden medirse a través de la capacitancia de la muestra aplicando una diferencia de potencial. Conforme la intensidad del campo aumenta, el estado de distorsión del nemático también aumenta y la constante dieléctrica cambia cuando el nemático no pasa a otra mesofase, lo que cambia es su configuración inicial.

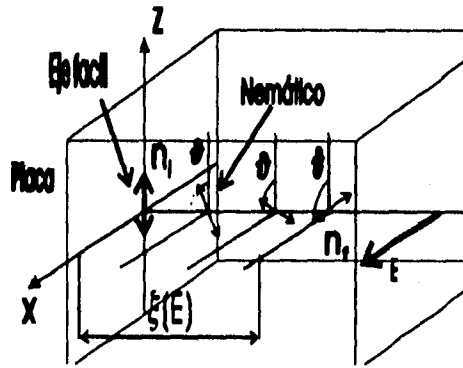


Figura 1.16: Reorientación de las moléculas por medio de un campo eléctrico. Si el campo eléctrico es mucho mayor que su valor crítico entonces, la longitud de coherencia es diferente de cero y aumenta hasta un valor cercano a la separación entre las placas

campo sobrepasa este valor, entonces ξ disminuye y ϵ aumenta hasta llegar a un cierto valor de saturación ϵ_s , en donde \vec{n} está totalmente orientado en la dirección del campo aplicado. Comúnmente las constantes elásticas del nemático se determinan por medio de este experimento, ya que el valor del campo crítico depende de dichas constantes[14].

Es importante señalar que debido a las características mecánicas de los cristales líquidos existe un acoplamiento entre el campo de velocidades \vec{v} del nemático y el vector director \vec{n} , lo que se manifiesta en el flujo hidrodinámico que produce la reorientación.

Como es de esperar, la introducción de los efectos de flujo complica la descripción de la dinámica de los cristales líquidos, por lo que comúnmente éstos efectos no son considerados en la mayoría de los estudios experimentales así como en los teóricos. Sin embargo, la presencia de estos efectos da lugar a fenómenos físicos importantes

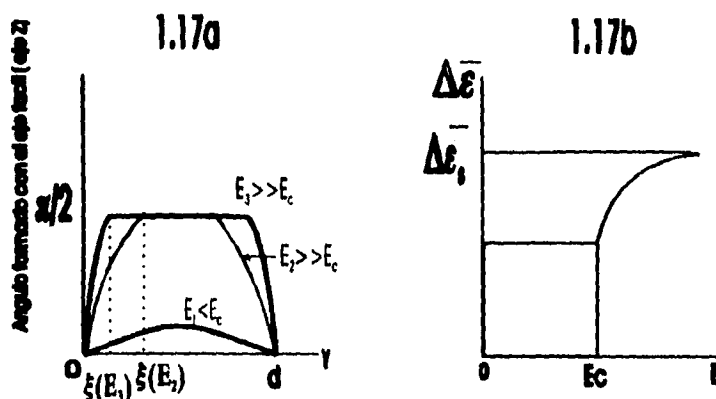


Figura 1.17: Etapas progresivas de la transición de Freedericksz. a) Relación del ángulo entre el "eje facil" (que en la figura 1.16 coincide con el eje z) y el vector \vec{n} . Se muestra también la longitud de coherencia para diferentes valores del campo externo b) Valores de la constante dieléctrica aparente de una muestra del nemático. Esta varía suavemente para valores por encima del campo crítico. Para valores mucho mayores que este, la mayoría de las moléculas están orientadas en dirección del campo y la constante dieléctrica alcanza su valor de saturación.

como la formación de estructuras espaciales transitorias durante las primeras etapas de reorientación [22] y también modifican en gran medida los tiempos de respuesta del cristal líquido cuando se aplican campos externos. Por esto es importante tomarlos en cuenta. Esto se hace en este trabajo.

El hecho de que las moléculas en un cristal líquido no estén ancladas en una posición fija como en los sólidos y que conserven el orden orientacional, permite modificar sus propiedades macroscópicas mediante la aplicación de campos externos con una intensidad pequeña (10^{-3} watts) en comparación con las intensidades empleadas para modificar las propiedades en las sustancias sólidas (10^6 watts), hecho que ha sido ampliamente explotado motivando su estudio y desarrollo tecnológico.

1.9 Transición de Freedericksz Óptica

El efecto Freedericksz estático discutido en la sección anterior fue observado por primera vez en el año de 1924 [15]. Desde entonces, ha sido estudiado en detalle utilizando además de campos externos estáticos, campos eléctricos alternos de baja frecuencia. Sin embargo, no fue hasta finales de los años 70 cuando se comienza a discutir la posibilidad de producir la reorientación con campos ópticos. Así, diversos grupos de investigación se enfocan a este problema [16][18][17][20] y en el año de 1980 el grupo de Zel'dovich logra observar que un campo óptico (frecuencias muy altas; 10^{14} Hz) produce una torca no oscilante que tiende a alinear a las moléculas en dirección de dicho campo, como si ésta fuera producida por un campo eléctrico estático, dando lugar a la *transición de Freedericksz óptica*. Este fenómeno es el punto central de esta tesis y por tanto será necesario dar una explicación más amplia acerca de éste.

Considérese el modelo descrito en la figura 1.18.

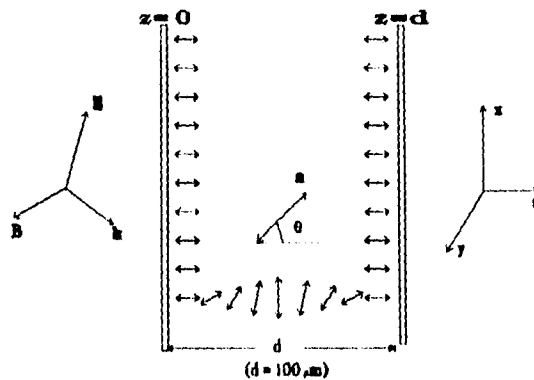


Figura 1.18: Geometría del efecto Freedericksz óptico

Este modelo es semejante al que se utiliza para el caso estático. Se tiene una película delgada de cristal líquido nemático ($d \sim 100 \mu\text{m}$) con una configuración inicial homeotrópica. Sobre la película incide en forma normal a las placas un haz de

laser polarizado en el plano xz , con dimensiones transversales mucho mayores que el espesor de la película, d^6 . El haz pasa por una lente de tal forma que el haz se concentre y la celda de nemático se coloca en un punto en el cual las ondas salientes son planas y por tanto el campo electromagnético presenta sólo dos componentes que en general serán función de z y de x . Debido a que los efectos de la parte eléctrica predominan sobre la parte magnética del campo óptico sólo se considerará la parte eléctrica:

$$\vec{E}(x, z, t) = E_x(x, z, t)i + E_z(x, z, t)k. \quad (1.13)$$

Se supone que las condiciones de frontera son de anclaje fuerte

$$\vec{n}(z = 0, z = d, t) = \vec{n}^0 \quad (1.14)$$

y los efectos de refracción y reflexión tampoco son considerados⁷.

Para este efecto la contribución a la densidad de energía libre debido a la interacción con el campo está dada por:

$$f_{opt} = -\frac{1}{8\pi} \epsilon_a(\omega) (\vec{n} \cdot \vec{E})^2, \quad (1.15)$$

con $\epsilon_a(\omega) = \epsilon_{\parallel}(\omega) - \epsilon_{\perp}(\omega)$ y ω la frecuencia del campo incidente. La torca inducida estará dada por:

$$\Gamma_{opt} = \frac{\epsilon_a(\omega)}{4\pi} (\vec{n} \cdot \vec{E})(\vec{n} \times \vec{E}). \quad (1.16)$$

Nótese que como estas expresiones son funciones cuadráticas del campo, los promedios temporales en general son diferentes de cero. Si el haz está linealmente polarizado el promedio temporal de la densidad de energía libre, ec.(1.15) es:

$$f_{opt} = -g(\vec{e}_p \cdot \vec{n})^2 I, \quad (1.17)$$

⁶ Como se discutirá más adelante, las dimensiones del haz afectan considerablemente el fenómeno de reorientación.

⁷ Esto se conoce como modelo de Ong.[23]

donde g es un factor que depende de los índices de refracción, \vec{e}_p es un vector unitario en la dirección de polarización y la intensidad del campo es I .

De igual forma que en el caso estático, existe un valor crítico para la intensidad del campo, $I_{c_{opt}}^2 = I_c$, a partir del cual las moléculas del nemático se reorientan en dirección del campo aplicado. Este valor, en general será diferente del correspondiente valor para el caso estático, debido a que la anisotropía dieléctrica depende ahora de la frecuencia⁸ y además el campo óptico tiene una componente adicional (E_x) que en general contribuye a disminuir su valor.

Cabe señalar, que una forma de distinguir cuando un campo es de "baja frecuencia" y cuando es de "frecuencias ópticas", es a través de la razón de la longitud de onda del campo incidente λ , al espesor de la película d . Si esta razón es mucho menor que 1, entonces se cae en el caso de campos ópticos, por el contrario si la razón es mucho mayor que 1, entonces se está tratando con campos alternos de baja frecuencia.

Otra de las diferencias con el caso de campos estáticos o alternos, radica en que las dimensiones transversales del haz afectan el proceso de reorientación. En el modelo discutido con anterioridad, las dimensiones transversales del haz son mucho mayores que el espesor de la película. Esto implica que el haz se comporta como un campo homogéneo que incide sobre la película, interactuando con todas las moléculas de la misma forma. Por el contrario, si las dimensiones transversales del haz fueran menores que el espesor de la película, entonces los efectos de las torcas elásticas producidas por las moléculas fuera de la región donde incide el haz, serán predominantes sobre las torcas inducidas por el campo de tal modo que se formarán una serie de dominios espaciales en donde las moléculas tendrán diferentes orientaciones.

Finalmente otra diferencia es la presencia de histéresis durante el proceso de reorientación [16]. Efecto que no ha sido observado en el caso estático y tampoco en el caso de campo alterno.

El efecto de reorientación es un proceso altamente no lineal (el tensor dieléctrico varía con la intensidad del campo óptico) y da lugar a diversos procesos no lineales⁹

⁸ Las relaciones de dispersión son conocidas para algunos nemáticos y sólo a frecuencias muy bajas

⁹ Efectos de autoenfocamiento, generación de segundo armónico, efecto Kerr, etc.

que han sido observados en sólidos utilizando campos muy intensos.

Así, se tiene que para un haz laser con longitud de onda menor que el ancho de la película en el cual se asume que presenta un frente de onda gaussiano¹⁰, se presentan fenómenos de autoenfocamiento (o desenfocamiento), que se manifiesta con la presencia de anillos concéntricos, cuyo número depende de la intensidad del laser, así como del ángulo de incidencia y de la polarización. La observación de este fenómeno fue realizada por Zolot'ko et al, en 1980. Este grupo encontró que conforme aumenta la intensidad del haz incidente polarizado, la divergencia del haz saliente, también aumenta en una forma muy pronunciada, de tal forma que para valores altos de la intensidad se forman estructuras complejas como los anillos. De la misma forma se encuentra que, para una potencia fija del laser, el ángulo de incidencia también da lugar a la formación de anillos, los cuales aumentan en número conforme el ángulo de incidencia crece[17].

Otro de los efectos asociados a la reorientación de nemáticos por un campo óptico es el de la birrefringencia inducida por dicho campo. Este efecto, conocido también como efecto Kerr, es el problema sobre el cual se enfocará esta tesis. La primera observación de este fenómeno fue hecha por el grupo de Durbin y Shen [20]. En este trabajo la reorientación del campo director, inicialmente en una configuración homeotrópica, se produce por medio de un haz láser polarizado, el cual se denomina haz o campo de "bombeo" ("Pumping Field"). Este haz incide en forma oblicua a las placas y conforme su intensidad aumenta habra un número mayor de moléculas orientadas en la dirección del campo, por lo que las propiedades ópticas del material cambian, en particular su birrefringencia. Esto se mide por medio de otro haz láser polarizado con una intensidad fija y menor que el "haz de bombeo", al cual se le denomina *haz de prueba* ("Probe Field"). Si este campo incide en forma normal a la celda con una fase inicial ϕ_0 , entonces al atravesar la celda de nemático sufrira un cambio de fase, que dependerá de la intensidad del campo de bombeo así como de su ángulo de incidencia. La diferencia entre la fase con que entra dicho haz y la fase con que sale es una medida de la birrefringencia. Los resultados se muestra en la gráfica

¹⁰Esto es las dimensiones transversales del haz varían presentando una distribución gaussiana de la irradiancia.

siguiente. En esta gráfica las curvas están parametrizadas con respecto al ángulo de incidencia del haz de bombeo..

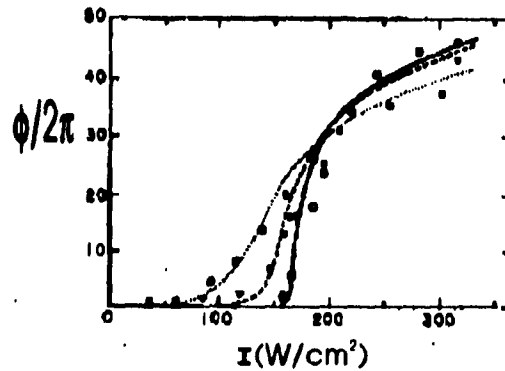


Figura 1.19: Experimento de Durbin y Shen. La gráfica muestra la relación entre el cambio de fase de la onda incidente (probe field) y la intensidad del campo óptico que reorienta a las moléculas (Pumping field). Los valores corresponden a una muestra de nemático 5CB. Las curvas están parametrizadas por el ángulo de incidencia del campo de bombeo.

Para concluir este capítulo, debemos recalcar que en la mayoría de los modelos, tanto teóricos como experimentales, los efectos de flujo (reflujo) asociados a la reorientación son despreciados, además, las fluctuaciones asociadas a los campos ópticos tampoco son consideradas. La introducción de las fluctuaciones, como se verá en los siguientes capítulos es necesaria para poder describir completamente el proceso de reorientación. Estas dos consideraciones se toman en cuenta en este trabajo.

Capítulo 2

ECUACIONES NEMATODINAMICAS

En este capítulo se presenta un resumen de la deducción de las ecuaciones hidrodinámicas para un cristal líquido nemático. El capítulo se divide en dos partes, en la primera se obtienen las ecuaciones nematodinámicas de manera determinista, basándose en la deducción variacional de De Gennes [1]. En la segunda se introducen fluctuaciones térmicas en éstas ecuaciones siguiendo el método desarrollado por San Miguel y Sagués [22].

2.1 Ecuaciones Nematodinámicas Deterministas.

Las ecuaciones hidrodinámicas de los nemáticos pueden deducirse utilizando diferentes puntos de vista [1][2][8][9][10][12]. Las primeras formulaciones [10] consideran al cristal líquido como un medio continuo, para el que se formulan ecuaciones de conservación, se proponen relaciones constitutivas y con ellas se construyen las ecuaciones hidrodinámicas. Otro enfoque adopta el punto de vista de la termodinámica irreversible lineal (TIL) [1]. En éste se considera a los procesos dinámicos que ocurren en los cristales líquidos como procesos irreversibles y se utiliza un método variacional para deducir ecuaciones de movimiento para las variables de estado relevantes. Este punto de vista será el que se adopte a lo largo del presente capítulo.

Como primer paso en esta deducción será necesario establecer las condiciones bajo las cuales el cristal líquido se encuentra en equilibrio termodinámico y posteriormente se utilizará la metodología de TIL para deducir la forma explícita de las ecuaciones nematodinámicas.

2.1.1 Condición de equilibrio termodinámico.

El punto de partida es la funcional de energía libre de Helmholtz F , la cual es función del campo director \vec{n} y de sus derivadas espaciales

$$F(n_\alpha, \partial_\beta n_\alpha) = \frac{1}{2} \int_V d\vec{r}^3 f(n_\alpha, \partial_\beta n_\alpha) \quad (2.1)$$

en donde V es el volumen ocupado por el nemático y f la densidad de energía libre. La condición de equilibrio se obtiene exigiendo que la variación de F sea nula, es decir,

$$\delta F = 0. \quad (2.2)$$

Pero la funcional F varía tanto por rotaciones de \vec{n} , como por los desplazamientos de los centros de gravedad de las moléculas que constituyen el cristal líquido. Primero se obtendrá la condición de equilibrio para las rotaciones de \vec{n} sin que existan desplazamientos y sujeta a la condición de simetría inherente a la fase nemática la cual esta dada por

$$n^2 = 1. \quad (2.3)$$

Ya que F está sujeta a la restricción anterior, para realizar la variación indicada en (2.2) será necesario emplear el método de multiplicadores de Lagrange [23]. En este método la restricción se toma en cuenta de la siguiente forma

$$\int d\vec{r}^3 f(n_\alpha, \partial_\beta n_\alpha) - \frac{1}{2} \int d\vec{r}^3 \lambda(\vec{r}^3) n^2(\vec{r}^3) = \text{extremo mínimo}, \quad (2.4)$$

en donde $\lambda(\vec{r}^3)$ es un coeficiente indeterminado de Lagrange.

Si ahora se calcula la variación de la ecuación anterior se obtiene

$$\delta \int d\vec{r} f(n_\beta, \partial_\alpha n_\beta) = \int d\vec{r} \lambda(\vec{r}) n_\beta \cdot \delta n_\beta. \quad (2.5)$$

Pero la variación de F dada por el miembro izquierdo de la ec.(2.5), se puede reescribir como[23]

$$\delta \int d\vec{r} f(n_\alpha, \partial_\beta n_\alpha) = \int d\vec{r} \left\{ \frac{\partial f}{\partial n_\beta} \delta n_\beta + \frac{\partial f}{\partial g_{\alpha\beta}} \delta(\partial_\alpha n_\beta) \right\} \quad (2.6)$$

en donde se ha definido

$$g_{\alpha\beta} \equiv \partial_\alpha n_\beta. \quad (2.7)$$

Integrando la ec. (2.6) por partes y despreciando los términos superficiales, ya que sólo se consideran las propiedades volumétricas del nemático, se tiene

$$\delta \int d\vec{r} f(n_\beta, \partial_\alpha n_\beta) = \int d\vec{r} \left\{ \frac{\partial f}{\partial n_\beta} - \partial_\alpha \left(\frac{\partial f}{\partial g_{\alpha\beta}} \right) \right\} \delta n_\beta. \quad (2.8)$$

Al substituir ésta ecuación en la ec. (2.5), se obtiene entonces la condición de equilibrio termodinámico, es decir,

$$h_\beta = -\frac{\partial f}{\partial n_\beta} + \partial_\alpha \left(\frac{\partial f}{\partial g_{\alpha\beta}} \right) = -\lambda(\vec{r}) n_\beta. \quad (2.9)$$

A \vec{h} se le llama "campo molecular" y la condición (2.9) asegura que en equilibrio termodinámico y en ausencia de desplazamientos moleculares, el campo molecular \vec{h} debe ser paralelo a \vec{n} .

Ahora se considerarán las variaciones de F debidas a desplazamientos de los centros de gravedad de las moléculas que mantienen fija la dirección de \vec{n} . Sea $\vec{u}(\vec{r})$ el desplazamiento del punto \vec{r} al punto \vec{r}' , o sea,

$$\vec{r}' = \vec{r} + \vec{u}(\vec{r}). \quad (2.10)$$

Ya que la dirección de \vec{n} no cambia, se cumple que

$$\vec{n}'(\vec{r}') = \vec{n}(\vec{r} + \vec{u}) = \vec{n}(\vec{r}). \quad (2.11)$$

Por otra parte, $\vec{n}'(\vec{r}')$ se relaciona con $\vec{n}(\vec{r})$ por medio de

$$\frac{\partial n'_\gamma}{\partial r'_\beta} = \frac{\partial n_\gamma}{\partial r_\alpha} \frac{\partial r_\alpha}{\partial r'_\beta} \quad (2.12)$$

con

$$\frac{\partial r_\alpha}{\partial r'_\beta} = \delta_{\alpha\beta} - \frac{\partial u_\alpha}{\partial r'_\beta} \simeq \delta_{\alpha\beta} - \partial_\beta u_\alpha, \quad (2.13)$$

y en donde se ha utilizado la notación $\partial_\beta \equiv \frac{\partial}{\partial r_\beta}$. Entonces, si los desplazamientos son pequeños, a primer orden en u se tiene que

$$\frac{\partial n'_\gamma}{\partial r'_\beta} - \frac{\partial n_\gamma}{\partial r_\beta} = -\partial_\alpha n_\gamma \partial_\beta u_\alpha + O(u^2). \quad (2.14)$$

Para el análisis siguiente deben considerarse explícitamente los diferentes términos de la energía libre de Helmholtz F que contribuyen a la variación producida por los desplazamientos moleculares. F contiene, en general, diferentes contribuciones como son: la energía libre de distorsión elástica $F_d = \int_V d\vec{r} f_d$ (energía de Frank [1]) dada por la ec.(1.1); la energía libre debida al acoplamiento con un campo electromagnético externo $F_{em} = \int_V d\vec{r} f_{em}$, ec.(1.9) y la contribución gravitacional F_g . Esta última contribución no se considerará en lo sucesivo.

Ahora bien, si el campo eléctrico es espacialmente homogéneo sólo produce rotaciones del vector \vec{n}^1 y no afectan la variación de la energía libre cuando se consideran desplazamientos moleculares. Entonces, al calcular la variación de F con respecto a traslaciones de moléculas, la contribución de la energía de acoplamiento con el campo eléctrico no contribuye y por tanto, sólo debe considerarse la contribución de la energía de distorsión F_d .

La variación de la energía de distorsión se obtiene sustituyendo en la ec.(2.8) la densidad de energía libre f_d dada por la ec.(1.2). Ya que \vec{n}^1 está fija, el primer término de la ec. (2.8) no contribuye y por tanto la variación de la energía de distorsión sólo depende de las derivadas espaciales de \vec{n}^1 , es decir,

$$\delta F_d = \int d\vec{r} \partial_\alpha \left(\frac{\partial f_d}{\partial g_{\alpha\beta}} \right). \quad (2.15)$$

¹Ya que las moléculas son eléctricamente neutras, estas no se desplazan por acción del campo

Sustituyendo la ec. (2.14) en la ecuación anterior, se tiene

$$\delta F_d \simeq \int d\vec{r} \left\{ \frac{\partial n'_\gamma}{\partial r'_\beta} - \frac{\partial n_\gamma}{\partial r_\beta} \right\} \frac{\partial f_d}{\partial g_{\alpha\beta}} = \int d\vec{r} \pi_{\beta\gamma} (-\partial_\alpha n_\gamma) (\partial_\beta u_\alpha) \quad (2.16)$$

en donde se ha definido

$$\pi_{\beta\gamma} \equiv \frac{\partial f_d}{\partial g_{\beta\gamma}}. \quad (2.17)$$

Más aún, si se define el tensor de esfuerzos de distorsión $\sigma_{\beta\alpha}^d$ como

$$\sigma_{\beta\alpha}^d \equiv -\pi_{\beta\gamma} \partial_\alpha n_\gamma, \quad (2.18)$$

la ec.(2.16) se reescribe como

$$\delta F_d = \int d\vec{r} \sigma_{\beta\alpha}^d \partial_\beta u_\alpha. \quad (2.19)$$

A partir de esta ecuación, la condición de equilibrio termodinámico, $\delta F = 0$, asociada con desplazamientos moleculares, se obtiene en forma análoga a la condición dada por la ec.(2.9), sólo que ahora la condición que debe satisfacerse es la de incompresibilidad del nemático, $div \vec{v} = 0$ o equivalentemente,

$$div \vec{u} = 0. \quad (2.20)$$

Así, la variación de F debida a desplazamientos de las moléculas se obtiene únicamente de la contribución de la energía de distorsión F y resulta ser

$$\delta F = \int d\vec{r} \sigma_{\beta\alpha}^e \partial_\beta u_\alpha, \quad (2.21)$$

en donde se ha introducido el tensor de esfuerzos de Ericksen definido como

$$\sigma_{\beta\alpha}^e \equiv \sigma_{\beta\alpha}^d - p(\vec{r}) \delta_{\alpha\beta}. \quad (2.22)$$

Aquí $p(\vec{r})$ es el multiplicador de Lagrange asociado con la restricción (2.20) y se identifica con la presión hidrostática.

La variación total de la energía libre de Helmholtz debida a ambos efectos se obtiene entonces sumando las ecs. (2.8) y (2.21),

$$\delta F = \int d\vec{r} \left\{ \sigma_{\beta\alpha}^e \partial_\beta u_\alpha - h_\gamma \cdot \delta n_\gamma \right\}. \quad (2.23)$$

Para expresar este resultado de una manera más conveniente, se integra por partes el primer término y se desprecian los términos superficiales. Debe mencionarse que estos términos contribuyen a los cambios en la energía libre cuando \vec{n} cambia en la frontera debido a desplazamientos de las paredes, pero no cuando se utilizan condiciones de frontera de anclaje fuerte para \vec{n} , como se hizo mención en el capítulo anterior. Así se obtiene que

$$\delta F = \int d\vec{r} \left[-u_\alpha (\partial_\beta \sigma_{\beta\alpha}^e) - h_\alpha \cdot \delta n_\alpha \right]. \quad (2.24)$$

Es necesario enfatizar que \vec{h} está definido en forma general por la ec.(2.9). Sin embargo, la forma explícita de la densidad de energía libre f depende de la situación particular bajo estudio. En este caso se han considerado explícitamente las contribuciones asociadas a la energía de Frank y la energía de acoplamiento con un campo eléctrico externo, dadas en el capítulo anterior por las ecs. (1.2 y 1.10). Entonces el campo molecular adquiere la forma

$$h_\gamma = \partial_\gamma \pi_{\gamma\alpha} - \frac{\partial f_d}{\partial n_\gamma} + \frac{\epsilon_a}{4\pi} (n_\alpha \cdot E_\alpha) E_\gamma \quad (2.25)$$

en donde ϵ_a es la anisotropía dieléctrica definida en la sección 1.8 como $\epsilon_a = \epsilon_\perp - \epsilon_\parallel$.

El primer término del miembro derecho de la ec.(2.24) se identifica con la fuerza volumétrica de la muestra, $\phi_\alpha \equiv \partial_\beta \sigma_{\beta\alpha}^e$, y la ecuación se interpreta entonces como el trabajo efectuado sobre el nemático por las paredes cuando estas se desplazan por \vec{u} , sin que \vec{n} cambie de orientación en la frontera.

Hasta este momento solamente se ha discutido la condición de equilibrio termodinámico sin tomar en cuenta los procesos dinámicos. Como se ha mencionado al inicio del capítulo, la dinámica del sistema puede describirse suponiendo que los procesos que ocurren en el cristal líquido son procesos irreversibles. Esto se discutirá a continuación.

2.1.2 Producción de entropía.

Desde un punto de vista mecánico, un cristal líquido nemático se comporta de una forma más compleja que un líquido isotrópico, ya que existe un acoplamiento entre el campo de velocidades $\vec{v}(\vec{r}, t)$ y el campo director $\vec{n}(\vec{r}, t)$. Por esta razón existen dos clases de disipación: una debida a los efectos viscosos y otra a la disipación de energía asociada con la rotación del eje óptico. Para describir éstos procesos disipativos el punto de partida usual en la literatura es considerar que todos los procesos son isotérmicos y que el cristal líquido satisface las condiciones de frontera de anclaje fuerte. Bajo éstas condiciones, TIL establece que para un proceso isotérmico la disipación o fuente de entropía esta dada por [24]

$$T \overset{\circ}{S} = -\frac{dF}{dt}. \quad (2.26)$$

Aquí el círculo o sobre la variable denota la derivada total con respecto al tiempo, $\frac{d}{dt}$ y la energía libre de Helmholtz F contiene ahora un término adicional que corresponde a la energía del flujo hidrodinámico, esto es,

$$F = \int d\vec{r} \left\{ \frac{1}{2} \rho v^2 + f_d + f_{em} \right\}. \quad (2.27)$$

En esta expresión v es la velocidad hidrodinámica y ρ la densidad local de masa. Sustituyendo F en la ec. (2.26) se tiene que

$$T \overset{\circ}{S} = -\frac{d}{dt} \int d\vec{r} \left\{ \frac{1}{2} \rho v^2 + f_d + f_{em} \right\}. \quad (2.28)$$

El primer término del miembro derecho se puede escribir en función del tensor de esfuerzos $\sigma_{\alpha\beta}$, utilizando la ecuación general para la conservación del momento en un medio continuo [25], a saber,

$$\rho \frac{dv_\beta}{dt} = \partial_\alpha \sigma_{\alpha\beta}. \quad (2.29)$$

Sustituyendo (2.29) en (2.28) e integrando por partes el primer término se obtiene

$$-\int d\vec{r} v_\beta \dot{v}_\beta = \int d\vec{r} \sigma_{\alpha\beta} \partial_\alpha v_\beta + \text{term. sup.} \quad (2.30)$$

Ahora se considerarán el segundo y tercer término de la ec.(2.28), para los cuales se ha calculado la variación total de F en la ec.(2.23). Utilizando las ecuaciones de movimiento de Hamilton[26],

$$\delta F = \sum_k \left(\frac{d}{dt} \frac{\partial F}{\partial \dot{n}_k} \delta \dot{n}_k + \frac{\partial F}{\partial n_k} \delta n_k \right) \quad (2.31)$$

se tiene que

$$- \frac{d}{dt} \int d\vec{r}' (f_d + f_e) = \int d\vec{r}' \{ \sigma_{\alpha\beta} \partial_\alpha v_\beta + h_\beta \dot{n}_\beta \} \quad (2.32)$$

La expresión general para la fuente de entropía, se obtiene entonces sumando las ecs.(2.30) y (2.32)

$$T \dot{S} = \int d\vec{r}' \{ (\sigma_{\alpha\beta} - \sigma_{\alpha\beta}^e) \partial_\alpha v_\beta + h_\beta \dot{n}_\beta \}. \quad (2.33)$$

Para un cristal líquido es usual definir el tensor de esfuerzos viscosos como $\sigma'_{\alpha\beta} = \sigma_{\alpha\beta} - \sigma_{\alpha\beta}^e$. En general $\sigma'_{\alpha\beta}$ es un tensor antisimétrico, siendo la parte antisimétrica una medida de la torca que \vec{n} ejerce sobre el medio circundante. Se puede mostrar explícitamente que la torca total se expresa como².

$$\Gamma_\beta = \sigma'_{\alpha\gamma} - \sigma'_{\gamma\alpha} = (\vec{n} \times \vec{h})_\beta. \quad (2.34)$$

Nótese que en equilibrio total esta torca es nula y \vec{h} es paralelo a \vec{n} , como previamente se ha mostrado.

Se puede reescribir la ec.(2.33) en una forma más compacta separando el gradiente de velocidades $\partial_\alpha v_\beta$, en su parte simétrica

$$A_{\alpha\beta} = \frac{1}{2} (\partial_\alpha v_\beta + \partial_\beta v_\alpha) \quad (2.35)$$

y su parte antisimétrica

$$\omega_\gamma = \frac{1}{2} (\partial_\alpha v_\beta - \partial_\beta v_\alpha) = \frac{1}{2} (\nabla \times \vec{v})_\gamma \quad (2.36)$$

Entonces la ecuación (2.33) se expresa como

²La demostración se encuentra en la sección 5.1 del libro de de Gennes

$$T \overset{\circ}{S} = \int d\vec{r} \left\{ \overleftrightarrow{A} : \overleftrightarrow{\sigma}^s - \Gamma_{\beta} \omega_{\beta} + h_{\alpha} \overset{\circ}{n}_{\alpha} \right\}, \quad (2.37)$$

en donde $\overleftrightarrow{\sigma}^s$ es la parte simétrica de $\overleftrightarrow{\sigma}$ y $(:)$ indica la doble contracción de los tensores correspondientes. Esta ecuación se puede reescribir de tal forma que se puedan identificar las contribuciones a la disipación. Definiendo \overrightarrow{N} como

$$\overrightarrow{N} \equiv \overset{\circ}{\vec{n}} - \overrightarrow{\omega} \times \vec{n}, \quad (2.38)$$

donde \overrightarrow{N} representa la razón temporal de cambio del campo director con respecto al medio circundante, la ec (2.37) toma la forma

$$T \overset{\circ}{S} = \int d\vec{r} \left\{ \overleftrightarrow{A} : \overleftrightarrow{\sigma}^s + \vec{h} \cdot \overrightarrow{N} \right\} \quad (2.39)$$

Esta ecuación representa la producción de entropía asociada con los procesos irreversibles que ocurren en el nemático. El primer término representa la disipación debido al flujo y el segundo término está asociado a la disipación producida por la rotación del eje óptico.

2.1.3 Relaciones fenomenológicas.

El siguiente paso para deducir las ecuaciones nematodinámicas será establecer las relaciones fenomenológicas entre flujos y fuerzas a partir de la interpretación de la producción de entropía como suma de productos de flujos y fuerzas termodinámicas.

Si los procesos irreversibles que ocurren en el sistema son tales que los estados fuera de equilibrio son de equilibrio local, la producción de entropía se puede expresar como una combinación lineal de flujos y fuerzas [24]. Sin embargo, la elección de los "flujos" y las "fuerzas" no es única. Aquí se adoptará la elección del grupo de Harvard [27] por lo que se escoge a $\overleftrightarrow{\sigma}^s$ y \vec{h} como flujos y, por tanto, \overleftrightarrow{A} y \overrightarrow{N} serán las correspondientes fuerzas termodinámicas. Entonces, de acuerdo con los postulados de TIL, $\overleftrightarrow{\sigma}^s$ y \vec{h} se expresan como

$$\sigma_{\alpha\beta}^s = R_{\alpha\beta\gamma\delta}(\vec{n}) A_{\gamma\delta} + Q_{\alpha\beta\gamma}(\vec{n}) h_{\gamma}, \quad (2.40)$$

$$N_\alpha = Q'_{\alpha\beta\gamma}(\vec{n})A_{\beta\gamma} + P_{\alpha\beta}(\vec{n})h_\beta, \quad (2.41)$$

en donde los tensores \vec{R} , \vec{Q} , \vec{Q}' y \vec{P} son coeficientes fenomenológicos indeterminados. Por otro lado, estas expresiones también deben ser invariantes ante cambios de \vec{n} por $-\vec{n}$ y satisfacer la condición de incompresibilidad del nemático. Finalmente, deben satisfacer las relaciones de Onsager, las cuales establecen que la matriz de coeficientes fenomenológicos

$$M = \begin{pmatrix} \vec{R} & \vec{Q} \\ \vec{Q}' & \vec{P} \end{pmatrix} \quad (2.42)$$

debe ser simétrica, lo que implica que $\vec{Q} = \vec{Q}'$. Bajo estas consideraciones, se puede mostrar que la forma más general que pueden adoptar los coeficientes fenomenológicos es [1]

$$\begin{aligned} \sigma_{\alpha\beta}^e &= 2\nu_2 A_{\alpha\beta} + 2(\nu_2 - \nu_3)(A_{\alpha\mu}n_\mu n_\beta + A_{\beta\mu}n_\mu n_\alpha) \\ &+ 2(\nu_1 + \nu_2 - 2\nu_3)n_\alpha n_\beta n_\mu A_{\mu\rho}n_\rho - \frac{\lambda}{2}(n_\alpha h_\beta + n_\beta h_\alpha) \end{aligned} \quad (2.43)$$

$$N_\alpha = \frac{h_\alpha}{\gamma_1} + \lambda A_{\alpha z} \text{ con } \alpha = x, y \quad (2.44)$$

Aquí $\nu_1, \nu_2, \nu_3, \gamma_1$ y γ_2 son diferentes coeficientes de viscosidad los cuales son positivos de acuerdo con la condición de aumento de entropía, y $\lambda \equiv \frac{\eta}{\eta}$ es un número adimensional.

La ecuación de movimiento para el director \vec{n} se obtiene de la ec.(2.38), cuando se sustituye la ec.(2.44) y la definición de campo molecular dado por la ec.(2.25), esto es

$$d_t n_\beta = \frac{h_\beta}{\gamma_1} + \frac{\lambda - 1}{2}(n_\alpha \partial_\beta v_\alpha) + \frac{\lambda + 1}{2}(n_\alpha \partial_\alpha v_\beta), \quad (2.45)$$

en esta ecuación el simbolo d_t se define como $d_t = \frac{d}{dt} + v \cdot \nabla$. El primer término de esta ecuación, describe la dinámica del director en ausencia de flujo hidrodinámico; los términos restantes acoplan al director con el campo de velocidades.

Análogamente, la ecuación de evolución temporal de la velocidad \vec{v} se obtiene sustituyendo $\overleftrightarrow{\sigma} = \overleftrightarrow{\sigma}^s + \overleftrightarrow{\sigma}^a$ en la ec.(2.29), donde $\overleftrightarrow{\sigma}^s$ esta dada por la ec. (2.43) para su parte simétrica y por Γ (ec (2.34)) para la parte antisimétrica, así como la definición del tensor de esfuerzos de Ericksen ec.(2.22), lo que resulta ser

$$\rho d_t v_\beta = \partial_\alpha \sigma_{\alpha\beta} = \left\{ \sigma_{\alpha\beta}^e - \sigma_{\alpha\beta}^e + \frac{1}{2}(n_\beta h_\alpha - n_\alpha h_\beta) \right\} \quad (2.46)$$

Es importante recalcar que a partir de esta ecuación se puede recuperar las ecuaciones hidrodinámicas para el campo de velocidades de un fluido isotrópico convencional (Navier-Stokes) si se toma el límite cuando $\vec{n} \rightarrow 0$ en $\overleftrightarrow{\sigma}^s$, y se considera el término del tensor de Ericksen proporcional a la presión.

2.2 Nematodinámica Estocástica

La descripción de la transición Freedericksz³ necesita incorporar a las fluctuaciones cuando se describen las primeras etapas de reorientación, ya que el sistema inicialmente en equilibrio, se lleva a un estado inestable a través de la variación de alguno de sus parámetros de control, como el campo eléctrico. Por tanto, las fluctuaciones juegan un papel relevante ya que estas, al inicio del proceso son pequeñas, pero al aumentar la intensidad del campo eléctrico se van amplificando hasta disparar el proceso de decaimiento de un estado inestable a un estado de equilibrio estable.

Este problema de transición o relajación entre dos estados de equilibrio junto con la descripción de transiciones de fase y el estudio de inestabilidades hidrodinámicas forma parte de una serie de problemas generales en la física estadística cuyo tratamiento y descripción utilizan las técnicas desarrolladas en el estudio de la dinámica crítica. Para el caso particular de los cristales líquidos San Miguel y Sagués emplean éstas técnicas para desarrollar las ecuaciones nematodinámicas suplementadas con fluctuaciones[22].

El efecto de las fluctuaciones térmicas en la hidrodinámica de cristales líquidos puede ser introducido en las ecuaciones dinámicas a través de un modelo de Ginzburg-Landau generalizado y dependiente del tiempo. Este tipo de modelo ha sido utilizado

³Esta se discutió en la última sección del capítulo anterior.

ampliamente para estudiar la dinámica crítica así como la dinámica de transiciones de fase. El modelo proporciona una ecuación dinámica de Langevin que incorpora los procesos básicos reversibles así como procesos disipativos.

La ecuación generalizada de Langevin está escrita en términos de una funcional de energía $F[\Phi_i(\vec{r}, t)]$ para las variables relevantes del sistema $\Phi_i(\vec{r}, t)$,

$$\partial_t \Phi_i(\vec{r}, t) = V(\Phi_i(\vec{r}, t)) - L_{ij} \frac{\delta F[\Phi_i(\vec{r}, t)]}{\delta \Phi_j(\vec{r}, t)} + \zeta_i(\vec{r}, t), \quad (2.47)$$

$V[\Phi_i]$ incluye los términos no disipativos y el segundo término es la parte disipativa. L es una matriz de coeficientes generalizados de Onsager. El último término es la contribución de las fluctuaciones consideradas como ruido térmico gaussiano y que satisfacen las siguientes relaciones de fluctuación disipación,

$$\langle \zeta_i(\vec{r}, t) \zeta_j(\vec{r}', t') \rangle = 2k_B T L_{ij} \delta(\vec{r} - \vec{r}') \delta(t - t'), \quad (2.48)$$

Esta ecuación tiene asociada una ecuación de Fokker-Planck para la densidad de probabilidad dada por:

$$\begin{aligned} \partial_t P[\Phi_i] = & - \int d\vec{r} \frac{\delta}{\delta \Phi_i} (V_i(\Phi_i) e^{-\frac{F[\Phi_i]}{k_B T}}) + \int d\vec{r} \frac{\delta}{\delta \Phi_i} \left[L_{ij} \frac{\delta F[\Phi_i]}{\delta \Phi_j} P[\Phi_i] \right] \\ & + 2k_B T \int d\vec{r} \frac{\delta^2}{\delta \Phi_i \delta \Phi_j} (L_{ij} P[\Phi_i]) \end{aligned} \quad (2.49)$$

En la ref [22] se prueba que si se satisfacen las relaciones de fluctuación-disipación, dadas por la ec.(2.48) y se cumple la condición de que $V_i[\Phi]$ sea una función no disipativa

$$\int d\vec{r} \frac{\delta}{\delta \Phi_i} (V_i(\Phi_i) e^{-\frac{F[\Phi_i]}{k_B T}}) = 0, \quad (2.50)$$

entonces la solución estacionaria de la ecuación de Fokker-Planck esta dada por:

$$P_{st} = N \exp\left(-\frac{F[\Phi_i]}{k_B T}\right), \quad (2.51)$$

con k_B igual a la constante de Boltzman y N es una constante de normalización.

En esta sección describiremos la formulación de San Miguel y Sagués, que introduce explícitamente las fluctuaciones en las ecuaciones nematodinámicas.

Para aplicar el método consideramos a \vec{n}^* , \vec{v}^* , \vec{u}^* como las variables de estado del sistema y se parte de las ecs.(2.45) y (2.46), rescribiéndolas de tal forma que adopten la estructura de la ec.(2.47), para posteriormente distinguir los procesos disipativos y no disipativos. Estas contribuciones se escribirán en términos de derivadas funcionales de la energía libre F , por medio de los siguientes operadores [22]

$$L_{\beta\gamma}(\vec{n}^*) = \partial_\alpha M_{\alpha\beta\delta\gamma} \partial_\delta \quad (2.52)$$

$$M_{\alpha\beta\gamma\delta}(\vec{n}^*) = \frac{1}{\rho^2} (2(\nu_1 + \nu_2 - 2\nu_3)n_\alpha n_\beta n_\gamma n_\delta + \nu_2(\delta_{\beta\delta}\delta_{\alpha\gamma} + \delta_{\alpha\delta}\delta_{\beta\gamma}) + (\nu_3 - \nu_2)(n_\alpha n_\gamma \delta_{\beta\delta} + n_\alpha n_\delta \delta_{\beta\gamma} + n_\beta n_\gamma \delta_{\alpha\delta} + n_\beta n_\delta \delta_{\alpha\gamma})) \quad (2.53)$$

$$\Gamma_{\beta\gamma}(\vec{n}^*) = \frac{1}{2\rho} [(\lambda + 1)n_\alpha \partial_\alpha \delta_{\beta\gamma} + (\lambda - 1)n_\alpha \partial_\beta \delta_{\alpha\gamma}] \quad (2.54)$$

Así, las ecuaciones nematodinámicas adquieren una forma más compacta en la cual se puedan identificar los términos disipativos y los no disipativos, a saber,

$$d_t n_\beta = -\frac{1}{\gamma_1} \frac{\delta F}{\delta n_\beta} + \Gamma_{\beta\gamma}(\vec{n}^*) \frac{\delta F}{\delta v_\gamma}, \quad (2.55)$$

$$d_t v_\beta = L_{\beta\gamma}(\vec{n}^*) \frac{\delta F}{\delta v_\gamma} - \Gamma_{\beta\gamma}^*(\vec{n}^*) \frac{\delta F}{\delta n_\gamma} - \frac{1}{\rho} \frac{\delta F}{\delta u_\beta}, \quad (2.56)$$

$$d_t u_\beta = \frac{1}{\rho} \frac{\delta F}{\delta v_\beta}. \quad (2.57)$$

Es posible expresar estas ecuaciones en una ecuación matricial definiendo al vector

$$\vec{\phi}(\vec{r}^*) = \{\vec{n}^*(\vec{r}^*), \vec{v}^*(\vec{r}^*), \vec{u}^*(\vec{r}^*)\}, \quad (2.58)$$

por lo que las ecs.(2.55-2.57) toman la forma

$$d_t \phi_i = A_{ij}(\vec{\phi}) \frac{\delta F}{\delta \phi_j}, \quad i = 1..9. \quad (2.59)$$

La matriz A_{ij} se descompone en su parte simétrica hermitiana relacionada con la contribución de los términos disipativos

$$A_{ij}^D = -L_{ij} = \begin{pmatrix} -\frac{\overline{T}}{\gamma_1} & 0 & 0 \\ 0 & \overleftrightarrow{L} & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (2.60)$$

en donde \overleftrightarrow{I} denota a la matriz identidad y \overleftrightarrow{L} esta dada por la ec.(2.52).

La parte antisimétrica y antihermitiana de \overleftrightarrow{A} representa a las contribuciones no disipativas.

$$A_{ij}^R = \begin{pmatrix} 0 & \overleftrightarrow{\Gamma} & 0 \\ -\overleftrightarrow{\Gamma}^\dagger & 0 & -\frac{\overline{T}}{\rho} \\ 0 & \frac{\overline{T}}{\rho} & 0 \end{pmatrix}, \quad (2.61)$$

con $\overleftrightarrow{\Gamma}$ definido por la ec.(2.54).

Al separar \overleftrightarrow{A} en su parte disipativa y no disipativa la ec.(2.59) adquiere la estructura de la ecuación de Langevin generalizada ec.(2.47).

Por medio de este método, es posible describir formalmente la dinámica de la transición de Freedericksz incorporando a las ecuaciones nematodinámicas fluctuaciones internas dadas por

$$s_i = (\zeta_i, \partial_\alpha \Omega_\beta, 0) \quad (2.62)$$

que satisfacen las relaciones de fluctuación-disipación, ec.(2.48).

Por tanto las ecs. (2.55-2.57) se transforman en ecuaciones nematodinámicas estocásticas al agregar las fluctuaciones s_i , tomando la forma

$$d_t n_\beta = -\frac{1}{\gamma_1} \frac{\delta F}{\delta n_\beta} + \Gamma_{\beta\gamma}(\overline{n}) \frac{\delta F}{\delta v_\gamma} + \zeta_\beta(\overline{r}, t), \quad (2.63)$$

$$d_t v_\beta = L_{\beta\gamma}(\overline{n}) \frac{\delta F}{\delta v_\gamma} - \Gamma_{\beta\gamma}^\dagger(\overline{n}) \frac{\delta F}{\delta n_\gamma} - \frac{1}{\rho} \frac{\delta F}{\delta u_\beta} + \partial_\alpha \Omega_\beta(\overline{r}, t), \quad (2.64)$$

$$d_t u_\beta = \frac{1}{\rho} \frac{\delta F}{\delta v_\beta}. \quad (2.65)$$

Estas ecuaciones constituyen un conjunto cerrado, son no lineales y la introducción de las fluctuaciones internas se efectuó de tal forma que reproducen la distribución

de probabilidades estacionaria ec.(2.51) sin embargo, además de este tipo de ruido, pueden incorporarse a dichas ecuaciones fluctuaciones externas impuestas al sistema a través de cierto parámetro de control. Esto se discutirá en la siguiente sección.

Cabe señalar que esta formulación, hasta donde sabemos, es la única que se ha efectuado de manera estocástica y será el punto de partida para el análisis de la dinámica de diversos procesos en nemáticos bajo diferentes aproximaciones y geometrías.

Capítulo 3

RUIDO EXTERNO

Ya que este trabajo tiene por objeto el estudio de los efectos de ruido externo sobre la birrefringencia inducida en nemáticos, será necesario dar una descripción del método empleado para resolver problemas en donde aparece el ruido externo no lineal.¹

3.1 Introducción.

Como se mencionó en el capítulo anterior, las fluctuaciones juegan un papel fundamental en la dinámica de reorientación de un nemático cuando ocurre el efecto Fredericksz². Esta situación es una manifestación de un comportamiento más general que ocurre en todos los sistemas físicos cuando éstos pasan de un estado de equilibrio estable a otro inestable relajando a un nuevo estado de equilibrio [29][30][31]. En este tipo de procesos la evidencia experimental muestra que en la vecindad de un punto inestable las fluctuaciones son tan grandes comparadas con aquellas en equilibrio que hacen necesaria su inclusión en la dinámica del sistema para poder describir la transición de un estado de equilibrio a otro[28].

Dichas fluctuaciones pueden ser de dos tipos: internas y externas. Las fluctua-

¹Como se verá más adelante, al definir el modelo, las fluctuaciones aparecen en las ecuaciones nematodinámicas en forma cuadrática.

²Estas se consideraron en las ecuaciones nematodinámicas como ruido térmico a través de un modelo generalizado de Ginzburg-Landau.

ciones internas, son aquellas que tienen su origen en la naturaleza molecular de la materia. El efecto colectivo de estas se considera, cuando se está describiendo la dinámica de un sistema a un nivel mesoscópico, a través de un término aleatorio que principalmente depende de la temperatura. Por otro lado, las fluctuaciones externas se originan fuera del sistema y pueden concebirse como un campo externo actuando sobre él. Este tipo de ruido se impone al sistema a través de alguno de sus parámetros, pudiéndose controlar de manera independiente a la evolución del mismo. Una diferencia entre las fluctuaciones externas y las internas, es que las primeras no escalan con el tamaño del sistema.

En algunos fenómenos físicos las fluctuaciones externas intervienen de manera lineal en las ecuaciones dinámicas del sistema. Su descripción es, en este caso, un problema bien entendido existiendo métodos bien establecidos para este propósito [28]. Sin embargo, una gran variedad de sistemas físicos, fisicoquímicos e hidrodinámicos como son reacciones fotoquímicas [32], cristales líquidos [33], circuitos eléctricos [34] o sistemas de Rayleigh-Benard [35] se caracterizan por introducir al ruido externo en forma no lineal dentro de las ecuaciones que gobiernan su dinámica. Para estos casos el tratamiento y descripción de los efectos de ruido es poco conocido y está menos desarrollado que el del ruido externo lineal.

En ambos casos, las fluctuaciones lineales o no, se pueden modelar por dos procesos diferentes: *ruido blanco* y *ruido de color*. El ruido blanco es un proceso markofiano donde el tiempo de correlación entre las fluctuaciones es nulo. Por el contrario, el ruido de color es un proceso no markofiano, por lo que el tiempo de correlación es corto pero no nulo. Este último proceso describe situaciones más reales ya que la mayoría de los fenómenos presentan fluctuaciones con tiempos de correlación finitos y diferentes de cero.

La aproximación de ruido blanco, resulta satisfactoria en el caso de ruido externo lineal, sin embargo, como se verá más adelante, esta aproximación pierde sentido en el caso no lineal debido a inconsistencias matemáticas. Ya que el propósito de este capítulo es la descripción de ruido externo no lineal entonces, las fluctuaciones necesariamente se modelarán como ruido de color.

El capítulo se divide en dos secciones. La primera trata el caso de ruido externo

lineal y presenta las ideas generales que servirán de base para que en la siguiente sección se trate el caso más complicado de ruido externo no lineal.

En lo que resta de este trabajo solamente se tratará el caso de ruido externo, despreciando las fluctuaciones térmicas introducidas previamente.

3.2 Ruido externo lineal

Existen pocos métodos para tratar el problema de fluctuaciones con tiempo de correlación finito (*ruido de color*). Diversos tratamientos se le ha dado a este problema; ya sea por eliminación adiabática [37], considerando al ruido como dicotómico [38] o modelándolo por medio de procesos tipo *Ornstein-Uhlenbeck* [28]. Este último método será el que se aplique en este trabajo para el tratamiento de ruido externo de color.

El tratamiento a seguir se divide en dos partes: en la primera se establece la ecuación fenomenológica que describe la evolución temporal de cierta variable de estado q en ausencia de ruido. En la segunda se introducen las fluctuaciones en el parámetro de control del sistema, dando lugar a una ecuación diferencial estocástica del tipo Langevin. En esta ecuación las fluctuaciones aparecen en forma multiplicativa, modelándose por un proceso de Ornstein-Uhlenbeck. Una vez definido el proceso se deduce la correspondiente ecuación de Fokker-Planck para la densidad de probabilidad, con la que se obtiene la información estadística en términos de los parámetros de ruido³.

3.2.1 Ecuación de Fokker-Planck para el caso lineal

El punto de partida es la ecuación fenomenológica que describe la evolución temporal de la variable de estado q

$$\frac{dq}{dt} = f(q) + \alpha g(q), \quad (3.1)$$

³Cabe señalar que la densidad de probabilidad con la que se trabaja se refiere únicamente a promedios que se realizan a un tiempo dado y no a la probabilidad de transición

en donde $f(q)$ y $g(q)$ son funciones arbitrarias q y α es un parámetro de control cuyos valores dependen de las condiciones externas al sistema. El valor de α fluctúa alrededor de cierto valor $\bar{\alpha}$ de acuerdo a:

$$\alpha = \bar{\alpha} + \xi(t), \quad (3.2)$$

siendo $\bar{\alpha}$ el valor promedio de α y $\xi(t)$ la fluctuación que se impone al sistema. Introduciendo α en la ec.(3.1) da lugar a la siguiente ecuación de *Langevin*

$$\frac{dq}{dt} = f(q) + \bar{\alpha}g(q) + \xi(t)g(q). \quad (3.3)$$

Nótese que el último término es estocástico y que el ruido aparece en forma multiplicativa.

Es razonable considerar que las fluctuaciones siguen una estadística gaussiana con un tiempo de correlación corto pero finito. Para definir completamente al ruido, $\xi(t)$ se modela por un proceso de Ornstein-Uhlenbeck [39].

Este proceso tiene las propiedades de ser gaussiano, estacionario y markofiano. Su valor medio es cero

$$\langle \xi(t) \rangle = 0, \quad (3.4)$$

y la función de correlación esta dada por

$$\langle \xi(t)\xi(t') \rangle = \gamma(t, t') = \frac{D}{\tau} \exp\left\{-\frac{(t-t')}{\tau}\right\}, \quad t > t'. \quad (3.5)$$

Aquí τ y D son los parámetros de ruido; τ es el tiempo de correlación y D mide la intensidad de las fluctuaciones.

Ahora bien, si se considera que para cada realización de $\xi(t)$ existe un ensamble de sistemas,⁴ que se distinguen solamente por las condiciones iniciales, entonces es posible caracterizar dicho ensamble por una densidad de probabilidad $\rho(q, t) = \delta(q(t) - q)$, que obedece la siguiente ecuación de continuidad en el espacio de q (Ec. de Liouville) [40],

⁴o bien una infinidad de trayectorias posibles $q(t)$ en el espacio de q

$$\frac{\partial \rho(q, t)}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial q} (f(q) + \bar{\alpha}g(q) + g(q)\xi(t)) \rho(q, t). \quad (3.6)$$

Si $\rho(q, t)$ se promedia sobre todas las realizaciones posibles de $\xi(t)$ y sobre las condiciones iniciales entonces, se obtiene la densidad de probabilidad $P(q, t)$ del proceso, esto es,

$$P(q, t) = \langle \rho(q, t) \rangle = \langle \delta(q(t) - q) \rangle, \quad (3.7)$$

en donde $q(t)$ es la solución formal de la ec.(3.3) y los parentesis, $\langle \dots \rangle$, indican que el promedio es sobre la distribución de $\xi(t)$ y sobre las condiciones iniciales. Promediando de esta forma la ec.(3.5), se obtiene una ecuación para la densidad de probabilidad $P(q, t)$

$$\frac{\partial P(q, t)}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial q} (f(q) + \bar{\alpha}g(q)) P(q, t) - \frac{\partial g}{\partial q}(q) \langle \xi(t) (\delta(q(t) - q)) \rangle. \quad (3.8)$$

Para calcular el segundo término de esta ecuación se hace uso de las propiedades estadísticas de $\xi(t)$ a través del teorema de Novikov, que interpreta las propiedades gaussianas de $\xi(t)$ en términos de funcionales [41]. Este teorema establece que para una funcional dada, $\Phi[\xi]$ se cumple que:

$$\langle \xi(t) \Phi[\xi] \rangle = \int dt' \gamma(t, t') \left\langle \frac{\delta \Phi[\xi]}{\delta \xi(t')} \right\rangle \quad (3.9)$$

Si $\delta(q(t) - q)$ se toma como la funcional de $\xi(t)$, entonces,

$$\begin{aligned} \langle \xi(t) \delta(q(t) - q) \rangle &= \int_0^t dt' \gamma(t, t') \left\langle \frac{\delta [\delta(q(t) - q)]}{\delta \xi(t')} \right\rangle \\ &= -\frac{\partial}{\partial q} \int dt' \gamma(t, t') \left\langle \delta(q(t) - q) \frac{\delta q(t)}{\delta \xi(t')} \right\rangle. \end{aligned} \quad (3.10)$$

Substituyendo en la ec.(3.7) se obtiene:

$$\begin{aligned} \frac{\partial P(q, t)}{\partial t} &= -\frac{\partial}{\partial q} (f(q) + \bar{\alpha}g(q)) P(q, t) \\ &\quad + \frac{\partial}{\partial q} g(q) \frac{\partial}{\partial q} \int dt' \gamma(t, t') \left\langle \delta(q(t) - q) \frac{\delta q(t)}{\delta \xi(t')} \right\rangle \end{aligned} \quad (3.11)$$

Si el tiempo de correlación τ es pequeño, entonces la integral que aparece en el segundo término de la ecuación anterior, puede evaluarse desarrollando a $\gamma(t, t')$ en una serie de potencias de τ ,

$$\gamma(t, t') = 2D \left[\delta(t - t') + \tau \frac{d}{dt'} \delta(t - t') + \tau^2 \frac{d^2}{dt'^2} \delta(t - t') + \dots \right], \quad (3.12)$$

que al substituir en la ec.(3.11) se tiene,

$$\begin{aligned} \int dt' \gamma(t, t') \left\langle \delta(q(t) - q) \frac{\delta q(t)}{\delta \xi(t')} \right\rangle &= \int dt' 2D \delta(t - t') \left\langle \delta(q(t) - q) \frac{\delta q(t)}{\delta \xi(t')} \right\rangle \\ &+ \tau \frac{d}{dt'} \delta(t - t') \left\langle \delta(q(t) - q) \frac{\delta q(t)}{\delta \xi(t')} \right\rangle \\ &+ \tau^2 \frac{d^2}{dt'^2} \delta(t - t') \left\langle \delta(q(t) - q) \frac{\delta q(t)}{\delta \xi(t')} \right\rangle + \dots \end{aligned} \quad (3.13)$$

El primer término del lado derecho es:

$$\int dt' 2D \delta(t - t') \left\langle \delta(q(t) - q) \frac{\delta q(t)}{\delta \xi(t')} \right\rangle = 2D \left\langle \delta(q(t) - q) \frac{\delta q(t)}{\delta \xi(t)} \right\rangle. \quad (3.14)$$

Los dos últimos términos se integran por partes y se desprecian los términos de frontera

$$2D \int dt' \tau \frac{d}{dt'} \delta(t - t') \left\langle \delta(q(t) - q) \frac{\delta q(t)}{\delta \xi(t')} \right\rangle \sim -2D\tau \int dt' \delta(t - t') \left\langle \delta(q(t) - q) \frac{d}{dt'} \frac{\delta q(t)}{\delta \xi(t')} \right\rangle, \quad (3.15)$$

$$\int dt' \tau^2 \frac{d^2}{dt'^2} \delta(t - t') \left\langle \delta(q(t) - q) \frac{\delta q(t)}{\delta \xi(t')} \right\rangle \sim \int dt' \tau^2 \delta(t - t') \left\langle \delta(q(t) - q) \frac{d^2}{dt'^2} \frac{\delta q(t)}{\delta \xi(t')} \right\rangle. \quad (3.16)$$

Para evaluar los términos anteriores se debe calcular la cantidad $\frac{\delta q(t)}{\delta \xi(t')}$, así como sus dos primeras derivadas temporales con respecto a t' . Estas se obtiene en el apéndice de la ref [28]. El cálculo se basa en la solución formal de la ec.(3.3).

Bajo la aproximación a tiempos iguales, $t=t'$, estas funciones aportan la mayor contribución a las integrales. Con esta aproximación se tiene que:

$$\frac{\delta q(t)}{\delta \xi(t)} = g(q(t)) \quad (3.17)$$

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{\delta q(t)}{\delta \xi(t')} \right) |_{t=t'} = f(q(t)) \frac{d}{dq} g(q(t)) - g(q(t)) \frac{d}{dq} f(q(t)) \quad (3.18)$$

Estas cantidades se interpretan como funciones de respuesta al ruido externo para la ec.(3.3). La última integral, ec.(3.16), no se considera ya que al substituir este término en la ec.(3.13), aparecen derivadas de tercer orden en q para $P(q,t)$, y por tanto deja de ser una ecuación de Fokker-Planck. Al substituir (3.14) y (3.15) en la ec.(3.13) se obtiene una ecuación de Fokker-Planck válida a primer orden en τ .

$$\begin{aligned} \frac{\partial P(q,t)}{\partial t} &= -\frac{\partial}{\partial q} (f(q) + \bar{\alpha}g(q)) P(q,t) + D \frac{\partial}{\partial q} g(q) \frac{\partial}{\partial q} h(q) P(q,t) \\ &= -\frac{\partial}{\partial q} (f(q) + \bar{\alpha}g(q) + Dh(q) \frac{d}{dq} g(q)) P(q,t) + D \frac{\partial^2}{\partial q^2} g(q) h(q) P(q,t) \end{aligned} \quad (3.19)$$

donde

$$h(q) = g(q) - \tau \left(f(q) \frac{d}{dq} g(q) - g(q) \frac{d}{dq} f(q) \right) \quad (3.20)$$

El coeficiente del primer término en la ec.(3.19) se conoce como coeficiente de arrastre, el coeficiente del segundo término es el coeficiente de difusión y siempre será positivo.

El dominio de definición de la EFP está dado por los valores de q , para los cuales el coeficiente de difusión efectiva $Dg(q)h(q)$ es positivo, de tal forma que la ec. (3.19) se encuentra restringida por la condición

$$Dg(q)h(q) > 0 \quad (3.21)$$

o análogamente

$$1 + \tau g(q) \frac{d}{dq} \left(\frac{f(q)}{g(q)} \right) > 0 \quad (3.22)$$

3.3 Ruido Externo no lineal.

Esta sección tiene por objeto describir el método desarrollado por San Miguel y Sagués [42] para tratar problemas con ruido externo cuadrático. El método proporciona una ecuación de Fokker-Planck asociada a cierta ecuación diferencial estocástica en donde las fluctuaciones entran en forma cuadrática.

Como se verá en el capítulo siguiente, las ecuaciones dinámicas del campo director que describen el proceso de reorientación durante la transición de Freedericksz, presentan a la amplitud del campo óptico (que juega el papel del parámetro de control) en forma cuadrática. Al permitir que este fluctúe, entonces, las ecuaciones adoptan la estructura de una ecuación diferencial estocástica tipo Langevin como la mencionada en el primer párrafo. Así, con el método que a continuación se describe se construye una ecuación de Fokker-Planck asociada a las ecuaciones nematodinámicas, a partir de la cual, se obtiene los momentos de distribución necesarios para el cálculo de la birrefringencia inducida en cristales líquidos.

3.3.1 Ecuación de Fokker-Planck (EFP)

El método es análogo al descrito en la sección anterior para ruido lineal. La finalidad es obtener una ecuación de Fokker-Planck para la densidad de probabilidad $P(q,t)$, asociada a la ecuación fenomenológica para la variable de estado q descrita por:

$$\frac{dq(t)}{dt} = f(q) + \alpha^2 g(q), \quad (3.23)$$

en donde $f(q)$ y $g(q)$ son funciones arbitrarias de q y α es el parámetro de control que ahora aparece en forma cuadrática. Este fluctúa alrededor del valor medio $\bar{\alpha}$ de acuerdo:

$$\alpha = \bar{\alpha} + \xi(t), \quad (3.24)$$

$\xi(t)$ es la fluctuación que se impone al sistema. Al introducir α en (3.23) se obtiene

$$\frac{dq(t)}{dt} = f(q) + \bar{\alpha}^2 g(q) + 2\bar{\alpha}g(q)\xi(t) + g(q)\xi^2(t) \quad (3.25)$$

Nótese que en esta ecuación el ruido aparece en forma no lineal y multiplicativa. Si $\xi(t)$ sigue una estadística gaussiana, entonces se puede modelar por un proceso de Ornstein-Uhlenbeck, cuyas propiedades se discutieron en la sección anterior, ecs.(3.4) y (3.5). Bajo estas suposiciones el proceso queda completamente definido y la ec.(3.24) se convierte en una ecuación diferencial estocástica tipo Langevin no lineal.

Una vez que ha sido planteada esta ecuación y realizadas las suposiciones sobre $\xi(t)$ se procede a asociarle una ecuación para la densidad de probabilidad $P(q,t)$ (Ec. de Fokker-Planck).

Esta ecuación se obtiene para el caso no lineal haciendo aproximaciones y suposiciones concretas sobre los parámetros de control del ruido; D y τ . Como se verá a continuación

Aproximación a Ruido Blanco.

Como primera aproximación a la EFP se reescribe la ecuación (3.25) de tal forma que el ruido $\xi(t)$ que aparece en esta ecuación se sustituya por otro ruido $\eta(t)$ el cual entra en forma lineal en dicha ecuación. Para este efecto se reescribe el valor de α^2 ;

$$\alpha^2 = \bar{\alpha}^2 + 2\bar{\alpha}\xi(t) + \xi^2(t), \quad (3.26)$$

como un valor medio que se calcula con la ec.(3.24) y la función de correlación de $\xi(t)$, ec.(3.5),

$$\langle \alpha^2 \rangle = \bar{\alpha}^2 + \frac{D}{\tau}, \quad (3.27)$$

más una fluctuación $\eta(t)$, esto es,

$$\alpha^2 = \langle \alpha^2 \rangle + \eta(t) \quad (3.28)$$

La fluctuación $\eta(t)$, es una transformación no lineal del proceso gaussiano $\xi(t)$,

$$\eta(t) = \xi^2(t) + 2\bar{\alpha}\xi(t) - \frac{D}{\tau} \quad (3.29)$$

Este proceso deja de ser gaussiano, su valor medio es cero y la función de correlación se obtiene utilizando la ec.(3.5) y las propiedades estadísticas de $\xi(t)$ ⁵

$$\langle \eta(t)\eta(t') \rangle = \frac{4\bar{\alpha}^2 D}{\tau} \exp\left\{-\frac{|t-t'|}{\tau}\right\} + 2\left(\frac{D}{\tau}\right)^2 \exp\{-2|t-t'|\}. \quad (3.30)$$

Como se ha mencionado, si el ruido externo fuera modelado por un ruido blanco, entonces en la ecuación anterior aparecería el cuadrado de una delta de Dirac y en la ec.(3.27) tendería a infinito.

Hasta este momento solamente se ha reescrito el valor de α^2 como un valor medio $\langle \alpha^2 \rangle$ más su fluctuación $\eta(t)$, sin embargo, aunque esta separación es siempre posible, el valor medio de α^2 , como se ve en (3.27) depende de las características del ruido, por lo que al analizar los resultados en términos de los parámetros de ruido no puede tomarse a $\langle \alpha^2 \rangle$ como una cantidad fija si α es controlada por los parámetros fluctuantes.

Considerando lo anterior, se pueden efectuar algunas aproximaciones sobre $\eta(t)$. La primera consiste en despreciar los momentos de distribución de esta cantidad mayores a dos, de tal forma que $\eta(t)$ se aproxime a un proceso gaussiano. La segunda consiste en considerar al tiempo de correlación τ muy pequeño, por lo que $\eta(t)$ se aproxima a un proceso de ruido blanco. Con estas aproximaciones la función de correlación de $\eta(t)$ se reduce a

$$\langle \eta(t)\eta(t') \rangle \cong 2(4\bar{\alpha}^2 D + \frac{D^2}{\tau})\delta(t-t'). \quad (3.31)$$

Esta expresión se obtiene después de tomar el límite cuando τ tiende a cero por lo que las exponenciales que aparecen en la ec.(3.29) se reducen a deltas de Dirac. El coeficiente que multiplica a la delta es la intensidad efectiva, que está dada por:

$$D' = \int_0^\infty dt' \langle \eta(t)\eta(t') \rangle = 4\bar{\alpha}^2 D + \frac{D^2}{\tau} \quad (3.32)$$

⁵ $\langle \xi^2(t)\xi^2(t') \rangle = \langle \xi(t)\xi(t') \rangle^2 + 2\langle \xi^2(t) \rangle \langle \xi^2(t') \rangle$ y $\langle \xi(t)\xi^2(t') \rangle = 0$

Una vez que se han hecho estas aproximaciones el proceso queda completamente definido cuando se sustituye la ec.(3.28) en la ec.(3.23), obteniéndose la siguiente ecuación diferencial estocástica, en donde el ruido aparece en forma lineal,

$$\frac{dq(t)}{dt} = f(q) + (\bar{\alpha}^2 + \frac{D}{\tau})g(q) + g(q)\eta(t). \quad (3.33)$$

Esta ecuación se discutió en la sección anterior y tiene asociada una EFP dada por

$$\frac{\partial P(q,t)}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial q}(f(q) + (\alpha^2 + \frac{D}{\tau})g(q))P(q,t) + D'\frac{\partial}{\partial q}g(q)\frac{\partial}{\partial q}g(q)P(q,t) \quad (3.34)$$

Es preciso notar que entre esta ecuación y la correspondiente al caso del ruido externo lineal, (ec.(3.19)) existen diferencias. La primera es la contribución $\frac{Dg(q)}{\tau}$ en (3.34) para el término de arrastre, la segunda es un cambio del coeficiente D por uno renormalizado D' .

Esta ecuación será corregida, para tal fin se construye de manera sistemática una ecuación en la cual sea posible obtener el orden de los términos despreciados en la aproximación de ruido blanco.

Aproximación para τ y D pequeños

El punto de partida es la ecuación de Liouville para la densidad de probabilidad en el espacio de eventos de q , correspondiente a la ec.(3.25),

$$\frac{\partial \rho(q,t)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial q}(f(q) + \bar{\alpha}^2 g(q) + 2\bar{\alpha}^2 g(q)\xi(t) + g(q)\xi^2(t)) \quad (3.35)$$

donde $\rho(q,t)$ es la densidad de probabilidad para cada realización de $\xi(t)$.

Al promediar esta ecuación sobre todas las realizaciones de $\xi(t)$ y sobre las condiciones iniciales se obtiene una ecuación para la densidad de probabilidad $P(q,t)$ ⁶.

$$\begin{aligned} \frac{\partial P(q,t)}{\partial t} = & -\frac{\partial}{\partial q}(f(q) + \bar{\alpha}^2 g(q))P(q,t) - \frac{\partial}{\partial q}(2\bar{\alpha}g(q)\langle \xi(t)\delta(q(t)-q) \rangle) \\ & - \frac{\partial}{\partial q}g(q)\langle \xi^2(t)\delta(q(t)-q) \rangle \end{aligned} \quad (3.36)$$

⁶Este promedio es el mismo que se efectuó en la ec.(3.7)

Si bien esta ecuación es exacta, no es cerrada para $P(q, t)$ por lo que se necesita usar nuevamente el teorema de Novikov, ec.(3.9) y su generalización

$$\langle \xi^2(t) \Phi[\xi] \rangle = \langle \xi^2 \rangle \langle \Phi[\xi] \rangle + \int ds \int ds' \gamma(t, s) \gamma(t, s') \left\langle \frac{\partial^2 \Phi[\xi]}{\partial \xi(s) \partial \xi(s')} \right\rangle \quad (3.37)$$

La funcional $\Phi[\xi]$ de $\xi(t)$ se toma como: $\delta(q(t) - q)$.

Sustituyendo (3.9) y (3.37) en (3.36) se tiene :

$$\begin{aligned} \frac{\partial P(q, t)}{\partial t} = & -\frac{\partial}{\partial q} \left(f(q) + (\bar{\alpha}^2 + \frac{D}{\tau}) g(q) \right) P(q, t) + 2\bar{\alpha} \frac{\partial}{\partial q} g(q) \frac{\partial}{\partial q} \int ds \gamma(t, s) \left\langle \frac{\delta q(t)}{\delta \xi(s)} \delta(q(t) - q) \right\rangle \\ & + \frac{\partial}{\partial q} g(q) \frac{\partial}{\partial q} \int ds \int ds' \gamma(t, s) \gamma(t, s') \left\langle \frac{\delta^2 q(t)}{\delta \xi(s) \delta \xi(s')} \delta(q(t) - q) \right\rangle \\ & - \frac{\partial}{\partial q} \left(g(q) \int ds \int ds' \gamma(t, s) \gamma(t, s') \frac{\partial}{\partial q} \left\langle \frac{\delta q(t)}{\delta \xi(s)} \frac{\partial}{\partial q} \frac{\delta q(t)}{\delta \xi(s')} \delta(q(t) - q) \right\rangle \right) \end{aligned} \quad (3.38)$$

Nótese que el último término de esta ecuación contiene una derivada de tercer orden para $P(q, t)$, por lo que se debe efectuar una aproximación si se quiere obtener una ecuación de Fokker-Planck. Esta aproximación considera a τ como un parámetro de pequeñez, de tal forma que la función de correlación $\gamma(t, s')$ se expande en una serie de potencias de τ , hasta orden cero y en forma análoga al cálculo de la ec.(3.19) se deben evaluar las derivadas funcionales de $q(t)$ a tiempos iguales, ya que bajo esta aproximación estos términos, también conocidos como funciones de respuesta al ruido externo, aportan la mayor contribución a las integrales de la ec.(3.38).

Estas funciones de respuesta se calculan en el apéndice de la referencia [42], su cálculo se basa en la solución formal de la ec.(3.25) y son:

$$\frac{\delta q(t)}{\delta \xi(s)} \Big|_{s \approx t} = 2\bar{\alpha} g(q(t)) + 2g(q(t)) \xi(t) \quad (3.39)$$

$$\frac{\delta^2 q(t)}{\delta \xi(s) \delta \xi(s')} \Big|_{s, s' \approx t} = 2g(q(t)) \delta(s - s') + 4g(q(t)) \frac{\partial g(q(t))}{\partial q(t)} (\bar{\alpha}^2 + 2\bar{\alpha} \xi(t) + \xi^2(t)) \quad (3.40)$$

Nótese que estas cantidades dependen explícitamente de $\xi(t)$, este hecho implica que al efectuar la sustitución de (3.39) y (3.40) en (3.38), se debe aplicar sucesivamente el teorema de Novikov y su generalización (ecuaciones (3.9) y (3.37)), obteniéndose una

serie infinita de términos que contiene derivadas de todos los órdenes con respecto a q . Esto implica la aparición de una infinidad de términos a orden cero en τ .

Para poder truncar esta serie se debe considerar que el otro parámetro D sea pequeño, pero con $\frac{D}{\tau}$ finito. Bajo estas circunstancias el término de orden $\frac{D}{\tau}$ en la ec.(3.38) será el que aporte la mayor contribución a los efectos del ruido. Las correcciones a este término son del orden de $(\frac{D}{\tau}) \times \tau = D$ y $(\frac{D}{\tau}) \times D = \frac{D^2}{\tau}$. Estas contribuciones son aportadas por los primeros términos de las ecs.(3.39) y (3.40) respectivamente cuando se sustituyen en (3.38). Los términos restantes aportan contribuciones de mayor orden. Al despreciar las correcciones para órdenes mayores a uno, y considerando sólo los términos de orden D y $\frac{D^2}{\tau}$ se tiene la siguiente ecuación de Fokker-Planck:

$$\begin{aligned} \frac{\partial P(q,t)}{\partial t} = & -\frac{\partial}{\partial q}(f(q) + (\bar{\alpha}^2 + \frac{D}{\tau})g(q))P(q,t) + 4\bar{\alpha}^2 \frac{\partial}{\partial q}g(q) \frac{\partial}{\partial q}g(q) \int_0^t ds \gamma(t,s)P(q,t) \\ & + 2\frac{\partial}{\partial q}g(q) \frac{\partial}{\partial q}g(q) \int_0^t ds \int_0^t ds' \gamma(t,s)\gamma(t,s')\delta(s-s')P(q,t) + O(D\tau, \frac{D^3}{\tau}, D^2) \end{aligned} \quad (3.41)$$

Extendiendo las integrales de τ hasta ∞ en (3.41) y despreciando los términos transitorios de orden $e^{-\frac{t}{\tau}}$ ésta ecuación se reduce a la ec. (3.34).

Las ecuaciones anteriores están expresadas en variables adimensionales, las aproximaciones consideran que $D \ll 1$ y $\tau \ll 1$ siendo $\frac{D}{\tau} \approx 1$. Cuando α es una variable física, t tendrá unidades de tiempo y la intensidad D unidades de $\alpha^2 \tau'$. El tiempo de correlación τ' se mide en unidades del tiempo de relajación del sistema λ^{-1} . Por tanto τ pequeña significa que $\tau \ll \lambda^{-1}$. De igual forma la intensidad D' requiere que $D' \ll \bar{\alpha}^2 \lambda^{-1}$

En esta aproximación no se requiere que la fluctuación sea pequeña ya que $\frac{D}{\tau} \approx 1$ esto es $\frac{D'}{\tau'} = \bar{\alpha}^2$, pero es necesario que las fluctuaciones sean menores o del orden del valor medio de α .

Capítulo 4

ECUACIONES

NEMATODINAMICAS PARA

UNA GEOMETRIA ESPECIFICA

En los capítulos anteriores se han discutido tanto las características físicas de los cristales líquidos y las ecuaciones que gobiernan su dinámica, como la metodología empleada para el tratamiento de problemas con ruido externo no lineal. En este capítulo y en el que sigue se tratará el problema específico de esta tesis: la reorientación producida por un campo óptico cuya amplitud fluctúa en forma gaussiana.

4.1 Introducción

Como se mencionó en el capítulo 1, es posible reorientar las moléculas de un nemático por medio de un haz laser (TFO). Durante este proceso, el sistema inicialmente estable se lleva a un estado inestable a través de la variación de algún parámetro de control, que en este caso corresponde a la intensidad del campo óptico ($\sim E^2$). Así, cuando la intensidad alcanza su valor crítico, el sistema cae a un estado inestable, del cual tiende a relajarse a un nuevo estado de equilibrio estable.

Experimentalmente se sabe que las fluctuaciones que acompañan el proceso de decaimiento desde un estado inestable y son precisamente éstas fluctuaciones el mecan-

ismo que dispara dicho proceso [43]. Por ésto la descripción formal de la dinámica de transición de Freedericksz necesita incorporarlas.

Existen diversos trabajos que han estudiado este problema [44][45][22][47], pero la mayoría de ellos introducen las fluctuaciones como ruido térmico inherente al sistema. Sin embargo, es necesario considerar también a las fluctuaciones externas al sistema, como las que puede presentar el parámetro de control. Este efecto sólo ha sido considerado en algunos trabajos [45][22][47]. El hecho relevante en ellos es la introducción de fluctuaciones externas en el campo eléctrico o magnético (estáticos o cuasiestáticos), las cuales entran en forma no lineal (cuadrática) en las ecuaciones nematodinámicas, introduciendo un término adicional aleatorio. A diferencia de estos trabajos, en éste se consideran los efectos de flujo hidrodinámico asociados a la reorientación, así como la aplicación de un campo óptico cuyas fluctuaciones solamente dependen del tiempo.

La idea básica de esta tesis será la de describir las primeras etapas de reorientación del nemático, esto es, cuando el sistema inicia el decaimiento desde un estado inestable a un estado de equilibrio estable. Para ello se parte de las ecuaciones nematodinámicas obtenidas en el capítulo 2 (ecs.(2.63)-(2.65)) para una geometría particular. A través de diversas aproximaciones estas ecuaciones se simplifican, dando como resultado un par de ecuaciones para la amplitud de Fourier de cada componente del campo director \vec{n} . Dichas ecuaciones dependen explícitamente de la intensidad del campo óptico, cuando las fluctuaciones se introducen en la amplitud del campo, entonces se transformarán en ecuaciones estocásticas, adoptando la estructura de una ecuación tipo Langevin, en donde el ruido externo entra aditiva y cuadráticamente. Finalmente, como se discutió en el capítulo tres, estas ecuaciones tienen asociada una ecuación de Fokker-Planck para la distribución de probabilidades, de la que se obtienen los momentos de dicha distribución.

4.2 Modelo

Considérese una muestra de cristal líquido nemático a una temperatura fija contenida entre dos placas dieléctricas y transparentes con una separación d . Las placas se colocan en forma perpendicular al eje z , como se muestra en la figura 4.1

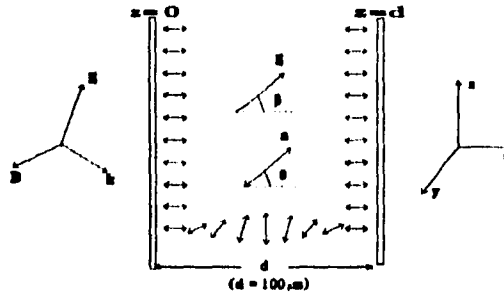


Figura 4.1: Geometría empleada en el modelo. La configuración inicial es homeotrópica y el campo óptico incide en forma oblicua.

Para este modelo, la configuración inicial es homeotrópica,

$$\vec{n}^0 = (0, 0, 1), \quad (4.1)$$

y las condiciones de frontera son de *anclaje fuerte*;

$$\begin{aligned} \vec{n}(x, y, 0) &= (0, 0, 1), \\ \vec{n}(x, y, d) &= (0, 0, 1). \end{aligned} \quad (4.2)$$

Sobre la muestra incide, en forma oblicua a las placas, un campo electromagnético (láser He-Ne) polarizado en el plano xz y cuya longitud de onda es mucho mayor que el ancho de la película (d). Es razonable despreciar los efectos de la parte magnética del campo, ya que la susceptibilidad magnética en la mayoría de los nemáticos es mucho menor que la susceptibilidad eléctrica, por lo que los efectos predominantes sobre las moléculas del nemático corresponden a la parte eléctrica. Además se considerará que las dimensiones transversales del haz son mucho mayores que la separación entre las placas y que el campo no presenta variaciones espaciales, por lo que éste será homogéneo dentro de la celda que contiene al nemático. Bajo estas suposiciones el campo eléctrico está dado por:

$$\vec{E}(t) = E_x(t)\hat{i} + E_z(t)\hat{k} \quad (4.3)$$

con

$$\begin{aligned} E_x(t) &= E(t) \cos \beta \\ E_z(t) &= E(t) \operatorname{sen} \beta \end{aligned} \quad (4.4)$$

en donde β es el ángulo de polarización del campo eléctrico dentro de nemático y $E(t)$ su amplitud. Ahora bien, estrictamente hablando, el problema de reorientación ocurre en las tres dimensiones, pero los resultados experimentales muestran que la reorientación de las moléculas tiene lugar principalmente en el plano de polarización, que en este caso es el xz . Por tanto las componentes de \vec{n}^* son:

$$\vec{n}^*(\vec{r}^*) = n_x(\vec{r}^*)\hat{i} + n_z(\vec{r}^*)\hat{k}. \quad (4.5)$$

Otra aproximación importante, considera que la onda incidente es plana y que el proceso de reorientación es homogéneo a lo largo de la dirección x y y , por lo que \vec{n}^* solamente será función de z .

Con las aproximaciones arriba mencionadas, las componentes de \vec{n}^* se pueden describir por el ángulo reorientación $\theta(z, t)$, que se mide con respecto a la orientación inicial (eje z). Así, \vec{n}^* se expresa como:

$$\vec{n}^* = (\operatorname{sen} \theta(z, t), 0, \cos \theta(z, t)). \quad (4.6)$$

Los efectos de reorientación dan lugar a un flujo hidrodinámico \vec{v}^* (figura 4.2).

La componentes v_y del campo de velocidades es nula debido a que la reorientación sólo tiene lugar en el plano xz . La componente v_z tampoco se considera, ya que dicha componente es pequeña en comparación con la componente v_x . Esto se debe a que la separación entre las placas es pequeña en comparación con su ancho y por tanto el flujo en ésta dirección también es pequeño en comparación con el flujo en la dirección x . Entonces el campo de velocidades se aproxima por el flujo de corte:

$$\vec{v}^*(z, t) = (v_x(z, t), 0, 0). \quad (4.7)$$

Bajo estas suposiciones, las ecuaciones (2.63 - 2.65) del capítulo dos se reducen a:

$$d_t n_x(z, t) = -\frac{1}{\gamma_1} \frac{\delta F^*}{\delta n_x} + \Gamma_{xx} \frac{\delta F^*}{\delta v_x}, \quad (4.8)$$

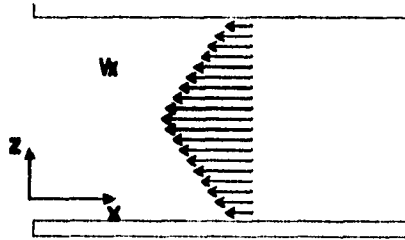


Figura 4.2: Dirección del flujo durante el proceso de reorientación. Como se puede apreciar es un flujo de "corte", en el cual se ha representado esquemáticamente la magnitud de la velocidad con el tamaño de las flechas.

$$d_t n_x(z, t) = -\frac{1}{\gamma_1} \frac{\delta F}{\delta n_x} + \Gamma_{zx} \frac{\delta F}{\delta v_x}, \quad (4.9)$$

$$d_t v_x(z, t) = L_{xx} \frac{\delta F}{\delta v_x} - \Gamma_{xx}^1 \frac{\delta F}{\delta v_x} - \Gamma_{xx}^1 \frac{\delta F}{\delta n_x}, \quad (4.10)$$

donde F es la funcional dada en el capítulo dos por la ec.(2.27), d_t es la derivada hidrodinámica ($d_t = \frac{\partial}{\partial t} + v \cdot \nabla$) y los operadores \overleftarrow{L} , $\overleftarrow{\Gamma}$ se definieron por las ecs.(2.52-2.54). Estas ecuaciones son no lineales, ya que los coeficientes Γ_{xx} , Γ_{zx} , L_{xx} , dependen de \vec{n} o de potencias de \vec{n} . En estas también se han despreciado las fluctuaciones térmicas y se ha supuesto que el centro de masa del elemento de volumen, \vec{u} , no se desplaza, sólo existen rotaciones del elemento de volumen alrededor del centro de masa por lo que la ecuación para \vec{u} no se considera.

Para linealizar dichas ecuaciones es necesario efectuar la aproximación de *acoplamiento mínimo* que consiste en reemplazar el valor de \vec{n} por su valor inicial \vec{n}^0 cuando se calculan los operadores $\overleftarrow{\Gamma}$ y \overleftarrow{L} . Esta aproximación es usual en la literatura y se justifica si se considera que en las primeras etapas de la reorientación \vec{n} difiere poco de su valor al inicio del proceso. Dicha aproximación, como se verá más adelante, retiene el acoplamiento que existe entre \vec{n} y \vec{v} , de tal forma que los efectos hidrodinámicos son considerados. Así, bajo esta aproximación las ecs.(2.52-2.54) se reducen a:

$$\Gamma_{zz} = \frac{\lambda + 1}{2\rho} \partial_z, \quad (4.11)$$

$$\Gamma_{zz} = 0, \quad (4.12)$$

$$\Gamma'_{zz} = -\Gamma_{zz} = -\frac{\lambda + 1}{2\rho} \partial_z, \quad (4.13)$$

$$\Gamma'_{zz} = -\Gamma_{zz} = 0, \quad (4.14)$$

$$L_{zz} = \partial_z M_{zzzz} \partial_z, \quad (4.15)$$

con

$$M_{zzzz} = \frac{v_3}{\rho^2}, \quad (4.16)$$

por lo que L_{zz} se escribe como

$$L_{zz} = \frac{v_3}{\rho^2} \partial_z^2. \quad (4.17)$$

Debe aclararse que en la terminología usada por San Miguel y Sagués [22], $\overleftarrow{\Gamma}$ es el operador adjunto de $\overrightarrow{\Gamma}$, el cual se toma en el sentido de integración por partes en forma análoga al tratamiento de los operadores en mecánica cuántica.

Sustituyendo estos operadores en las ecs.(4.8 - 4.10), éstas se reducen a

$$d_t n_x(z, t) = -\frac{1}{\gamma_1} \frac{\delta F}{\delta n_x} - \frac{\lambda + 1}{2\rho} \partial_z \frac{\delta F}{\delta v_x}, \quad (4.18)$$

$$d_t n_z(z, t) = -\frac{1}{\gamma_1} \frac{\delta F}{\delta n_z}, \quad (4.19)$$

$$d_t v_x(z, t) = \frac{v_3}{\rho^2} \partial_z^2 \frac{\delta F}{\delta v_x} + \frac{\lambda + 1}{2\rho} \partial_z \frac{\delta F}{\delta n_x}. \quad (4.20)$$

Estas ecuaciones ahora son lineales, cerradas y acopladas. Resta calcular las derivadas funcionales de la energía libre para la geometría específica del modelo.

4.3 Funcional de energía libre

La funcional de energía libre de Helmholtz dada por ec.(2.27) contiene tres contribuciones: la primera se debe a la energía de distorsión elástica, que se simplifica si se considera que el orden de magnitud de las constantes elásticas es el mismo y por tanto se pueden considerar iguales (cap.1 sec.7).

$$F_l = \frac{1}{2} K \int_V \{(\partial_z n_z)^2 + (\partial_z n_x)^2\} d\vec{r}. \quad (4.21)$$

La segunda contribución se debe al término de acoplamiento con el campo electromagnético y, como se mencionó al principio, sólo se considera la contribución eléctrica, teniéndose:

$$F_e = -\frac{\epsilon_a}{8\pi} \int_V (\vec{n} \cdot \vec{E})^2 d\vec{r}. \quad (4.22)$$

La última contribución se debe a la energía cinética causada por el flujo hidrodinámico asociado a la reorientación,

$$F_v = \frac{\rho}{2} \int_V v_x^2 d\vec{r}, \quad (4.23)$$

donde ρ es la densidad de masa del nemático y V es el volumen del nemático.

Sumando las tres contribuciones se tiene que la funcional de energía libre es:

$$F = \frac{1}{2} \int_V \left(K \{(\partial_z n_z)^2 + (\partial_z n_x)^2\} - \frac{\epsilon_a}{4\pi} (\vec{n} \cdot \vec{E})^2 + \frac{\rho}{2} v_x^2 \right) d\vec{r}, \quad (4.24)$$

y la densidad de energía libre estará dada por

$$f = \frac{1}{2} K \{(\partial_z n_z)^2 + (\partial_z n_x)^2\} - \frac{\epsilon_a}{4\pi} (\vec{n} \cdot \vec{E})^2 + \frac{\rho}{2} v_x^2. \quad (4.25)$$

Para obtener la forma explícita de las ecuaciones nematodinámicas en términos de \vec{n} y \vec{v} es preciso calcular las derivadas funcionales de la energía libre a través de la ec.(2.5) dada en el capítulo 2. Así, las derivadas funcionales de F están dadas por:

$$\frac{\delta F}{\delta n_x} = - \left\{ K \partial_z^2 n_x + \frac{\epsilon_a}{4\pi} (n_x E_x^2 + n_z E_x E_z) \right\}, \quad (4.26)$$

$$\frac{\delta F}{\delta n_z} = - \left\{ K \partial_z^2 n_z + \frac{\epsilon_a}{4\pi} (n_z E_z^2 + n_z E_x E_x) \right\}, \quad (4.27)$$

$$\frac{\delta F}{\delta v_z} = \rho v_z. \quad (4.28)$$

Al substituir éstas en las ecs.(4.18-4.20) se obtienen las ecuaciones nematodinámicas en términos de \vec{n} y de \vec{v} ,

$$d_t n_z = \frac{K}{\gamma_1} \partial_z^2 n_z + \frac{\epsilon_a}{4\pi\gamma_1} (n_z E_z^2 + n_z E_x E_x) + \frac{\lambda+1}{2} \partial_z v_z, \quad (4.29)$$

$$d_t n_x = \frac{K}{\gamma_1} \partial_z^2 n_x + \frac{\epsilon_a}{4\pi\gamma_1} (n_x E_z^2 + n_x E_x E_x), \quad (4.30)$$

$$d_t v_z = \frac{\nu_3}{\rho^2} \partial_z^2 v_z - \frac{\lambda+1}{2} \left\{ K \partial_z^2 n_z + \frac{\epsilon_a}{4\pi} \partial_z (n_z E_z^2 + n_z E_x E_x) \right\}. \quad (4.31)$$

donde d_t denota la derivada hidrodinámica definida previamente.

4.4 Ecuaciones de amplitud

Como se puede apreciar, las ecuaciones anteriores son ecuaciones diferenciales parciales y acopladas. Es deseable poder desacoplar dichas ecuaciones y aun más, reducir las a ecuaciones diferenciales ordinarias (ecuaciones de amplitud). Para esto se utilizan las aproximaciones de inercia despreciable, acoplamiento mínimo, así como la suposición de ángulos pequeños. Con estas aproximaciones el campo de velocidades \vec{v} y el campo director \vec{n} , se desacoplan al desarrollar éstas variables en series de Fourier compatibles con las condiciones de frontera, reduciéndose las ecs.(4.29-4.31) a ecuaciones diferenciales ordinarias para las nuevas variables; $n_{qx}(t)$ y $n_{qz}(t)$ que son las amplitudes de Fourier de n_x y n_z . Las ecuaciones resultantes serán las ecuaciones de amplitud.

La primera aproximación considera que el vector director es una variable lenta y que el campo de velocidades sigue instantáneamente al director, esto implica que el

cambio en la velocidad es pequeño y por tanto se puede despreciar la inercia, esto es: $d_t v_x = 0$.

Para ilustrar la importancia de la segunda y tercera aproximación, debe notarse que en el término de interacción con el campo eléctrico de las ecuaciones (4.29-4.31), el campo multiplica a las componentes de \vec{n} . Esto implica que al introducir las fluctuaciones en la amplitud de dicho campo, éstas también entrarán en forma multiplicativa, complicando el problema considerablemente. Cabe hacer un paréntesis y hablar un poco sobre éste problema. Si se considera que el ruido entra en forma multiplicativa, entonces por medio del método desarrollado en el capítulo 3 es posible asociar una ecuación de Fokker-Planck para la densidad de probabilidades de las amplitudes de Fourier de las componentes del campo director, a las ecs. (4.29) y (4.30). La ecuación de Fokker-Planck resultante no proporciona información que se pudiera utilizar en este modelo en particular, ya que al calcular el primer momento y el segundo momento de la distribución en el límite estacionario, dan como resultado cero o bien una cantidad que diverge.

Por lo anterior es deseable que el campo y por consiguiente las fluctuaciones aparezcan en forma aditiva, para esto se utiliza la suposición de ángulos pequeños en el término de interacción. Esta se justifica si se considera que en las primeras etapas de la reorientación, esto es para valores del campo eléctrico justo por arriba del campo crítico, los valores de \vec{n} no difieren mucho de el valor de \vec{n}^0 . Al aplicar ésta aproximación las ecuaciones (4.29) y (4.30) se desacoplan y aparece el campo eléctrico en forma aditiva.

Así, los términos de acoplamiento con el campo eléctrico se aproximan a:

$$n_x E_x^2 + n_x E_x E_x \approx F_x E_x, \quad (4.32)$$

$$n_z E_z^2 + n_z E_x E_x \approx E_z^2, \quad (4.33)$$

y las ecuaciones nematodinámicas válidas para las primeras etapas de reorientación son:

$$d_t n_x = \frac{K}{\gamma_1} \partial_z^2 n_x + \frac{\epsilon_a}{4\pi\gamma_1} E_x E_z + \frac{\lambda+1}{2} \partial_z v_x, \quad (4.34)$$

$$d_t n_z = \frac{K}{\gamma_1} \partial_z^2 n_z + \frac{\epsilon_a}{4\pi\gamma_1} E_z^2, \quad (4.35)$$

$$0 = \nu_3 \partial_z^2 v_x - \frac{\lambda+1}{2} K \partial_z^2 n_x. \quad (4.36)$$

Para reducir estas ecuaciones diferenciales parciales a ordinarias y desacoplar v_x de n_x , es necesario descomponer n_x, n_z , y v_x en series de Fourier consistentes con las condiciones de frontera

$$\begin{aligned} n_x &= 0 \\ n_z &= 1 \end{aligned} \quad \text{en } z = 0 \text{ y } z = d,$$

y de adhesión para v_x esto es,

$$v_x = 0 \text{ en } z = 0 \text{ y } z = d.$$

Las series de Fourier consistentes con las condiciones de frontera son:

$$n_x(z, t) = \sum_{m=0}^{\infty} n_{qx_m}(t) \text{sen}\left((2m+1)\frac{\pi z}{d}\right), \quad (4.37)$$

$$n_z(z, t) = \sum_{m=0}^{\infty} n_{qz_m}(t) \text{cos}\left((2m+1)\frac{\pi z}{d}\right), \quad (4.38)$$

$$v_x(z, t) = \sum_{m=0}^{\infty} v_{qx_m}(t) \text{sen}\left((2m+1)\frac{\pi z}{d}\right). \quad (4.39)$$

Ahora bien, como se esta describiendo las primeras etapas del proceso de decaimiento de un estado inestable a un estado de equilibrio estable, esto es, para valores del campo eléctrico ligeramente superiores al campo crítico, es razonable suponer que la energía del campo eléctrico solamente excite los modos mas bajos del desarrollo anterior, por lo que sólo se considerará el primer término de estas series, esto es el modo $m = 0$, que es el predominante. Por tanto las ecs.(4.37-4.39) se reducen a:

$$n_x(z, t) = n_{qx}(t) \text{sen}\left(\frac{\pi z}{d}\right), \quad (4.40)$$

$$n_x(z, t) = n_{qx}(t) \cos\left(\frac{\pi z}{d}\right), \quad (4.41)$$

$$v_x(z, t) = v_{qx}(t) \operatorname{sen}\left(\frac{\pi z}{d}\right), \quad (4.42)$$

en donde $n_{qx}(t)$, $n_{qz}(t)$ y $v_{qx}(t)$ son las amplitudes de Fourier para las componentes de \vec{n} y \vec{v} .

Al substituir los valores de n_x , n_z y v_x por sus componentes de Fourier (ecs. 4.40-4.42), despejando v_{qx} de la ec. (4.36) y substituyendo en la ec. (4.34) se obtienen dos ecuaciones diferenciales ordinarias y desacopladas para n_{qx} y n_{qz} ,

$$d_t n_{qx} \operatorname{sen}\left(\frac{\pi z}{d}\right) = -\frac{k\pi^2}{\gamma_1 d^2} n_{qx} \left(1 + \left(\frac{\lambda+1}{2}\right)^2 \frac{\gamma_1}{\nu_3}\right) \sin\left(\frac{\pi z}{d}\right) + \frac{\epsilon_a}{4\pi\gamma_1} E_x E_z, \quad (4.43)$$

$$d_t n_{qz} \cos\left(\frac{\pi z}{d}\right) = -\frac{k\pi^2}{\gamma_1 d^2} n_{qz} \cos\left(\frac{\pi z}{d}\right) + \frac{\epsilon_a}{4\pi\gamma_1} E_z^2. \quad (4.44)$$

Finalmente, sólo se considerarán propiedades volúmetricas por lo que estas ecuaciones se integran sobre z , eliminando la dependencia espacial. Así las ecuaciones finales para las amplitudes de las componentes de Fourier son las siguientes "ecuaciones de amplitud":

$$d_t n_{qx}(t) = -\frac{k\pi^2}{\gamma_1 d^2} n_{qx}(t) \left(1 + \left(\frac{\lambda+1}{2}\right)^2 \frac{\gamma_1}{\nu_3}\right) + \frac{\epsilon_a}{8\gamma_1} E_x E_z, \quad (4.45)$$

$$d_t n_{qz}(t) = -\frac{k\pi^2}{\gamma_1 d^2} n_{qz}(t) + \frac{\epsilon_a}{8\gamma_1} E_z^2. \quad (4.46)$$

Expresando al campo eléctrico en términos de su magnitud E y del ángulo de propagación β las ecuaciones anteriores adquieren la siguiente estructura general

$$d_t n_{q\alpha}(t) = -A_\alpha n_{q\alpha}(t) + B_\alpha E^2(t), \quad (4.47)$$

con $\alpha = x, z$ en donde,

$$A_x = \frac{k\pi^2}{\gamma_1 d^2} \left(1 + \left(\frac{\lambda+1}{2}\right)^2 \frac{\gamma_1}{\nu_3}\right), \quad (4.48)$$

$$A_z = \frac{k\pi^2}{\gamma_1 d^2}, \quad (4.49)$$

$$B_z = \frac{\epsilon_a}{8\gamma_1} \cos(\beta) \operatorname{sen}(\beta), \quad (4.50)$$

$$B_z = \frac{\epsilon_a}{8\gamma_1} \operatorname{sen}^2(\beta). \quad (4.51)$$

4.5 Ecuación de Fokker-Planck

Como se puede apreciar en la ecuación (4.47), el parámetro de control, esto es la amplitud del campo eléctrico, aparece en forma cuadrática y aditiva. Ahora bien, es razonable considerar que este parámetro presente fluctuaciones temporales. Ejemplo claro de esto es el ruido que se debe a los fenómenos cuánticos en el haz láser [36], o bien las fluctuaciones que se pueden superponer a la amplitud del campo óptico por medio de un generador de ruido [47]. Como se ha mencionado, la introducción de las fluctuaciones puede conducir a fenómenos que no podrían ser descritos por medio de un análisis determinista, como lo es el caso de la descripción dinámica del proceso de reorientación. En esta sección se introducen las fluctuaciones en la amplitud del campo eléctrico, que aparece en forma explícita en la ec.(4.47). Una vez definido el proceso que modela dichas fluctuaciones, entonces la ecuación (4.47) se convierte en una ecuación estocástica no lineal en el ruido y por tanto adoptará la estructura de la ecuación de Langevin (ec(3.3)) discutida en el capítulo 3. Finalmente, a la ecuación estocástica se le asocia una ecuación de Fokker-Planck para la distribución de Probabilidades $P(n_{q_a}(t), t)$ a partir de la cual se obtienen los momentos de distribución de $P(n_{q_a}(t), t)$ necesarios para el cálculo de la birrefringencia.

Como primer paso para la obtención de la ecuación de Fokker-Planck es necesario introducir las fluctuaciones en la ec.(4.47).

Es común suponer que el parámetro $E(t)$ fluctúa de acuerdo a una estadística gaussiana, por lo que es posible escribir a la amplitud del campo como el valor promedio temporal, \overline{E} , más su fluctuación $\xi(t)$, esto es,

$$E = \bar{E} + \xi(t), \quad (4.52)$$

en donde $\xi(t)$, se modela como un proceso de Ornstein-Uhlenbeck, ya que se desea que el proceso sea gaussiano, markofiano y estacionario [39]. Así, el valor medio $\langle \xi(t) \rangle$ es cero y la función de correlación está dada por la ec.(3.5) del capítulo 3

$$\gamma(t, t') = \langle \xi(t)\xi(t') \rangle = \frac{D}{\tau} \exp \left\{ -\frac{|t-t'|}{\tau} \right\}.$$

Al introducir la ec.(4.52) en la ec.(4.47), se obtiene una ecuación estocástica de Langevin en donde el ruido aparece en forma aditiva y cuadrática

$$d_t n_{q\alpha} = -A_\alpha n_{q\alpha} + 2B_\alpha \xi(t) \bar{E} + B_\alpha \bar{E}^2 + B_\alpha \xi^2(t) \quad (4.53)$$

Esta ecuación tiene la misma estructura que la ecuación de Langevin (3.25) con $f(q) = -A_\alpha n_{q\alpha}$ y $g(q) = B_\alpha$, y por tanto tiene asociada la siguiente ecuación de Fokker-Planck:

$$\begin{aligned} \partial_t P(n_{q\alpha}, t) = & -\frac{\partial}{\partial n_{q\alpha}} \left((-A_\alpha n_{q\alpha} + (\bar{E}^2 + \frac{D}{\tau} B_\alpha) P(n_{q\alpha}, t)) \right) \\ & + \left\{ \frac{4B_\alpha^2 D \bar{E}^2}{\tau A_\alpha + 1} \left(1 - e^{-t(\frac{1}{\tau} + A_\alpha)} \right) + \frac{2B_\alpha^2 D^2}{2\tau + A_\alpha \tau^2} \left(1 - e^{-t(\frac{1}{\tau} + A_\alpha)} \right) \right\} \frac{\partial^2}{\partial n_{q\alpha}^2} P(n_{q\alpha}, t). \end{aligned} \quad (4.54)$$

Para simplificar esta ecuación se desprecian los términos transitorios ($e^{-t(\frac{1}{\tau} + A_\alpha)}$ y $e^{-t(\frac{1}{\tau} + A_\alpha)}$). Esto implica que la ecuación de Fokker-Planck resultante sólo tendrá sentido si se utiliza para hallar la distribución de probabilidades en el estado estacionario ($t \rightarrow \infty$). Cabe señalar que el estado estacionario al cual se hace referencia no corresponde al estado final de la reorientación. Solamente es un proceso límite imaginario que proporciona cantidades que no dependen del tiempo. Recuerdese que, la descripción de todo el proceso de reorientación esta dado por las ecuaciones nematodinámicas en su forma más general, las cuales son altamente no lineales y esta descripción sólo se limita a las primeras etapas del proceso de reorientación.

Así, la ecuación de Fokker-Planck que resulta es:

$$\begin{aligned} \partial_t P(n_{q\alpha}, t) = & -\frac{\partial}{\partial n_{q\alpha}} \left((-A_\alpha n_{q\alpha} + (\bar{E}^2 + \frac{D}{\tau} B_\alpha) P(n_{q\alpha}, t)) \right) \\ & + \left\{ \frac{4B_\alpha^2 D \bar{E}^2}{\tau A_\alpha + 1} + \frac{2B_\alpha^2 D^2}{2\tau + A_\alpha \tau^2} \right\} \frac{\partial^2}{\partial n_{q\alpha}^2} P(n_{q\alpha}, t) \end{aligned} \quad (4.55)$$

4.6 Momentos de la distribución $P(n_{q\alpha}(t), t)$

A partir de la ecuación de Fokker-Planck es posible obtener toda la información estadística de las amplitudes de Fourier de cada componente del campo director \vec{n} .

En el caso de la distribución gaussiana es suficiente con conocer los dos primeros momentos de distribución para que el proceso quede definido¹.

Así pues, para encontrar el primer momento se multiplica la ec.(4.55) por $n_{q\alpha}$ y se integra sobre toda la distribución de $n_{q\alpha}$.

$$\int n_{q\alpha} \partial_t P(n_{q\alpha}, t) dn_{q\alpha} = \int n_{q\alpha} \left[-\frac{\partial}{\partial n_{q\alpha}} \left((-A_\alpha n_{q\alpha} + (\bar{E}^2 + \frac{D}{\tau} B_\alpha) P(n_{q\alpha}, t)) \right) \right] dn_{q\alpha} \\ + \int \left[\left\{ \frac{4B_\alpha^2 D \bar{E}^2}{\tau A_\alpha + 1} + \frac{2B_\alpha^2 D^2}{2\tau + A_\alpha \tau^2} \right\} \frac{\partial^2}{\partial n_{q\alpha}^2} P(n_{q\alpha}, t) \right] n_{q\alpha} dn_{q\alpha} \quad (4.56)$$

Cuando se intercambia el operador derivada por la integral del lado izquierdo de esta ecuación se obtiene la derivada temporal del valor medio de $n_{q\alpha}$:

$$\int n_{q\alpha} \partial_t P(n_{q\alpha}, t) dn_{q\alpha} = \partial_t \langle n_{q\alpha} \rangle \quad (4.57)$$

Para el segundo y tercer miembro del lado derecho se integra por partes y se desprecian los términos de frontera, esto es:

$$\int n_{q\alpha} \left[-\frac{\partial}{\partial n_{q\alpha}} \left((-A_\alpha n_{q\alpha} + (\bar{E}^2 + \frac{D}{\tau} B_\alpha) P(n_{q\alpha}, t)) \right) \right] dn_{q\alpha} = -A_\alpha \langle n_{q\alpha} \rangle + \bar{E}^2 + \frac{D}{\tau} B_\alpha, \\ \int \left[\left\{ \frac{4B_\alpha^2 D \bar{E}^2}{\tau A_\alpha + 1} + \frac{2B_\alpha^2 D^2}{2\tau + A_\alpha \tau^2} \right\} \frac{\partial^2}{\partial n_{q\alpha}^2} P(n_{q\alpha}, t) \right] n_{q\alpha} dn_{q\alpha} = 0. \quad (4.58)$$

Juntando todos los términos se obtiene una ecuación diferencial para $\langle n_{q\alpha} \rangle$:

$$d_t \langle n_{q\alpha} \rangle = -A_\alpha \langle n_{q\alpha} \rangle + (\bar{E}^2 + \frac{D}{\tau} B_\alpha), \quad (4.59)$$

cuya solución es:

$$\langle n_{q\alpha} \rangle = \langle n_{q\alpha 0} \rangle e^{-A_\alpha t} + (\bar{E}^2 + \frac{D}{\tau} B_\alpha) \left(\frac{1 - e^{-A_\alpha t}}{A_\alpha} \right), \quad (4.60)$$

El valor en el límite estacionario, $t \rightarrow \infty$, es:

$$\langle n_{q\alpha} \rangle_{st} = (\bar{E}^2 + \frac{D}{\tau} B_\alpha) \frac{1}{A_\alpha}. \quad (4.61)$$

¹En la distribución gaussiana, como es bien conocido, los momentos de distribución mayores a dos están en términos del primer y segundo momento.

En forma análoga se obtiene el segundo momento de distribución $\langle n_{q\alpha}^2 \rangle$, cuya solución estacionaria esta dada por

$$\langle n_{q\alpha}^2 \rangle_{st} = \bar{E}^4 \left(\frac{B_\alpha}{A_\alpha} \right)^2 + 2DB_\alpha^2 \bar{E}^2 \left(\frac{1}{\tau A_\alpha^2} + \frac{2}{A_\alpha + \tau A_\alpha^2} \right) \quad (4.62)$$

$$+ D^2 B_\alpha^2 \left(\frac{2}{2\tau A_\alpha + A_\alpha^2 \tau^2} + \left(\frac{1}{\tau A_\alpha} \right)^2 \right). \quad (4.63)$$

Capítulo 5

BIRREFRINGENCIA INDUCIDA

5.1 Introducción

Una de las propiedades más notables que presentan los cristales líquidos es la birrefringencia. Esto, como es natural explicar, se debe a la anisotropía que presentan sus propiedades eléctricas y magnéticas. Así, cuando estas propiedades macroscópicas cambian mediante la reorientación de las moléculas por un campo electromagnético, también lo hace la birrefringencia (efecto Kerr). Este fenómeno altamente no lineal y solamente producido en sólidos cristalinos anisotrópicos y en algunos líquidos no cristalinos mediante la aplicación de campos muy intensos, ha sido estudiado ampliamente desde el punto de vista teórico y experimental en cristales líquidos [47],[48],[49] y de hecho constituye uno de los fenómenos con mayor aplicación, ya que a través de él pueden conocerse algunos parámetros físicos del nemático como la magnitud del campo crítico, así como las constantes elásticas del material.

En este capítulo se obtendrá una expresión analítica para la birrefringencia inducida por las fluctuaciones en la amplitud del campo óptico. Dicha expresión será sólo válida para las primeras etapas de reorientación, esto es cuando las moléculas comienzan a reorientarse y los efectos de las fluctuaciones puedan ser considerables.

Antes de comenzar a desarrollar esta idea es preciso recordar lo que significa la birrefringencia y propiamente el efecto Kerr en los cristales sólidos, para aclarar un poco más lo que en este trabajo se hace.

5.2 Birrefringencia en sólidos cristalinos

La birrefringencia se presenta en muchas sustancias cristalinas compuestas por moléculas anisotrópicas. El modelo más simple para describir estas moléculas considera que las fuerzas sobre los electrones son anisotrópicas, esto es, son diferentes en cada dirección.

Para representar estas moléculas, se considera un modelo mecánico, en el cual los átomos están compuestos por una corteza de carga negativa unida a una carga positiva fija por medio de resortes de diferente rigidez [50]. Así, un electrón que se desplace del punto de equilibrio a lo largo de una dirección oscilará con una frecuencia característica diferente de aquella con la que lo haría si fuera desplazado en otra dirección.

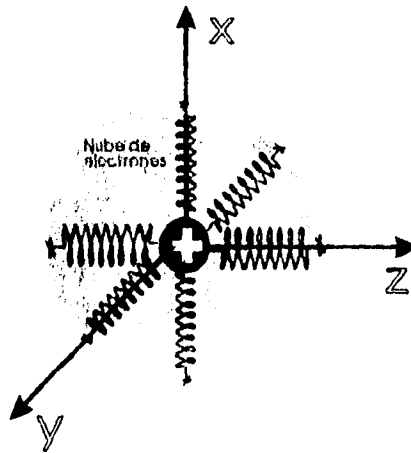


Figura 5.1: Modelo mecánico de una molécula anisotrópica

Cuando la luz se propaga a través de estas sustancias, los electrones son impulsados por el campo eléctrico reirradiando ondas secundarias que se combinan en una onda refractada, la cual se desplace a través del material. La velocidad con que esta onda se propaga está determinada entre otras cosas por la diferencia entre la frecuencia del

campo y la frecuencia característica del material¹. Esto implica que la anisotropía en la fuerza de enlace de los electrones se manifiesta en la anisotropía del índice de refracción. En el caso particular de fuerzas de enlace iguales en las direcciones x, y , la luz que incide sobre estos materiales se propagará con dos velocidades diferentes: una a lo largo del eje de simetría de las moléculas v_{\parallel} y la otra perpendicular este eje v_{\perp} .

Ahora bien, si la estructura de los cristales es tal que las moléculas anisotrópicas están ordenadas a lo largo de una dirección preferencial (material uniaxial), entonces al incidir una onda electromagnética sobre este medio esta se propagará con dos velocidades diferentes; una paralela al eje óptico v_{\parallel} y la otra perpendicular a él, v_{\perp} . Esto da lugar a dos tipos de ondas: ondas ordinarias o "esféricas" y ondas extraordinarias o "elipsoidales". La orientación del campo óptico con respecto al eje óptico determina las velocidades con las que estas ondas se expanden. Para las ondas o la velocidad de propagación será v_{\parallel} y el campo electromagnético asociado a estas será normal al eje óptico. En el caso de las ondas elipsoidales, e , se propagarán con una velocidad v_{\perp} y su campo será paralelo al eje óptico. Finalmente estas ondas se recombinan emergiendo una onda formada por dos ondas con estados de polarización mutuamente ortogonales.

Así, los materiales uniaxiales presentan dos índices de refracción: $n_o \equiv \frac{c}{v_{\parallel}}$ y $n_e \equiv \frac{c}{v_{\perp}}$, diferentes. La diferencia entre estos dos índices es una medida de la birrefringencia,

$$\Delta N \equiv n_o - n_e. \quad (5.1)$$

Dependiendo de la magnitud de las velocidades con que estas ondas se propagan se tiene materiales uniaxiales positivos o negativos. Así, si $v_{\parallel} > v_{\perp}$, entonces se tendrá un material uniaxial negativo, lo cual implica que las ondas o están encerradas por las ondas e . En el caso contrario, cuando $v_{\parallel} < v_{\perp}$ se tiene un material uniaxial positivo y por tanto las ondas esféricas encierran a las ondas elipsoidales (fig. 5.2).

¹Si el cristal es anisotrópico, puede incluso tener tres frecuencias características

ESTA TESIS NO DEBE
SALIR DE LA BIBLIOTECA

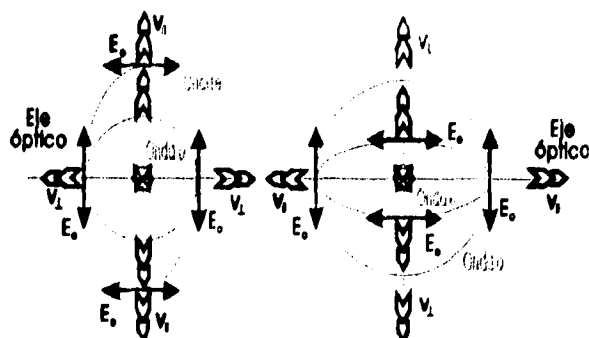


Figura 5.2: Ondas o y e. a) Medio uniaxial positivo b) Medio uniaxial negativo.

5.2.1 Efecto Kerr

La birrefringencia puede inducirse o cambiar en algunos materiales a través de la aplicación de campos eléctricos muy intensos (3×10^4 volts). Este efecto conocido como efecto Kerr fue descubierto por J. Kerr en 1875. Él observó que algunos líquidos isotrópicos, como el benceno y el nitrobenzeno, se convierten en sustancias birrefringentes cuando se les coloca en un campo eléctrico, presentando características de medios uniaxiales. El fenómeno se debe a una alineación parcial de las moléculas dirección del campo eléctrico aplicado, regresando a su configuración inicial cuando el campo aplicado es nulo. Este efecto también se presenta en sustancias sólidas cristalinas constituidas por moléculas anisotrópicas, por ejemplo el fosfato de deuterio de potasio (KD_2PO_4).

El arreglo experimental para medir la birrefringencia se muestra en la fig. 5.3

Este arreglo consta de una celda que contiene un líquido compuesto por moléculas isotrópicas, que se coloca entre dos electrodos a través de los cuales se aplica un campo eléctrico E . Sobre la celda incide un onda electromagnética, polarizada y con una longitud de onda λ_0 . Dicha onda tiene como finalidad medir los cambios que presenta el líquido en sus propiedades macroscópicas como la constante dieléctrica o la birrefringencia, mediante un estudio de sus estados de polarización final e inicial.

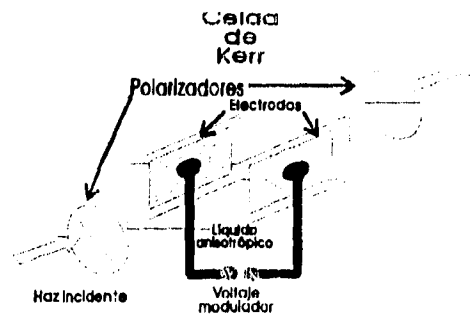


Figura 5.3: Arreglo experimental para medir el efecto Kerr. Una onda polarizada incide sobre la celda que contiene la sustancia anisotrópica. Al salir de la celda cambia de fase, esto se detecta con el polarizador al final de la celda.

Así, conforme aumenta la intensidad del campo E , la birrefringencia cambia manifestándose como un cambio en la polarización de la onda saliente, el cual se puede expresarse por medio de:

$$\Delta N = \lambda_0 K E^2, \quad (5.2)$$

donde K es una constante que depende de la temperatura, así como del materia. Dicha constante es conocida como constante de Kerr.

5.3 Birrefringencia inducida en cristales líquidos nemáticos

Para el caso de los cristales líquidos este efecto también aparece, pero a diferencia de los líquidos tratados con anterioridad, en la fase nemática del cristal líquido, las moléculas de entrada están orientadas a lo largo de una cierta dirección preferencial impuesta por las condiciones de frontera. Esto implica que el cristal líquido presente una birrefringencia intrínseca siendo esta igual a:

$$\Delta N = n_{\parallel} - n_{\perp}, \quad (5.3)$$

en donde n_{\parallel} y n_{\perp} son los índices de refracción paralelo y perpendicular al vector director \vec{n} .

Cuando el efecto Freedericksz ocurre, se produce un cambio en la orientación del campo director \vec{n} (que coincide con el eje óptico), de tal forma que \vec{n} tiende a alinearse en una dirección paralela a \vec{E} . Esto induce un cambio en la birrefringencia del nemático, ya que ahora el eje óptico se encuentra paralelo a la dirección del campo \vec{E} .

Este fenómeno ha sido discutido en la sección 9 del capítulo 1. Cabe señalar que los resultados obtenidos en la referencia [20] son para el proceso completo de reorientación, esto es cuando el vector director se reorienta por completo adquiriendo una nueva configuración.

En este trabajo, a diferencia del descrito en el capítulo 1, se obtendrá una expresión para la birrefringencia inducida durante la primeras etapas de reorientación como consecuencia de los cambios producidos en el campo director por la fluctuaciones presentes en la amplitud del campo eléctrico.

Así pues, la expresión para la birrefringencia inducida se obtiene por medio de la torca inducida por el campo eléctrico $\vec{E}(t)$, [5] esto es:

$$\vec{\Gamma}_{elec} = \vec{p} \times \vec{E}, \quad (5.4)$$

donde \vec{p} es el momento dipolar que consiste de dos partes; el momento dipolar permanente \vec{p}_p y el momento dipolar inducido, \vec{p}_i .

El momento dipolar permanente es paralelo al vector director \vec{n} ,

$$\vec{p}_p = \mu \vec{n}, \quad (5.5)$$

donde μ es la magnitud de dicho momento. Por otro lado, el momento dipolar inducido en un medio uniaxial, se escribe en términos del tensor dielectrico, ϵ_{ij} :

$$\begin{aligned} \vec{p}_i &= \epsilon_{\parallel} (\vec{n} \cdot \vec{E}) \vec{n} + \epsilon_{\perp} (\vec{E} - (\vec{n} \cdot \vec{E}) \vec{n}) \\ &= (\epsilon_{\perp} \delta_{ij} + \epsilon_a (n_i n_j)) E_j \equiv \vec{\epsilon} \circ \vec{E} \end{aligned} \quad (5.6)$$

En esta expresión, ϵ_{\parallel} y ϵ_{\perp} son las constantes dieléctricas paralela y perpendicular al vector director, ϵ_a es la anisotropía dieléctrica y el punto, $\langle \circ \rangle$, denota la contracción de tensores.

Ahora bien, una forma de medir la orientación de las moléculas puede ser a través de la polarización promedio de las moléculas del nemático:

$$\langle p \rangle = \langle \mu \vec{n} + \vec{\epsilon} \cdot \vec{E} \rangle, \quad (5.7)$$

en donde el promedio se efectúa sobre todas las orientaciones posibles de las moléculas. Cabe recalcar que la configuración inicial es homeotrópica y que al aplicar el campo eléctrico con valores cercanos al campo crítico, la alineación de las moléculas cambia debido a las fluctuaciones en la intensidad de dicho campo, así como por el campo mismo.

De igual forma, los cambios en la alineación se pueden determinar por medio del tensor de índice de refracción del material, el cual está dado por:

$$\hat{n}_{ij} = n_{\perp} \delta_{ij} + A \langle n_i n_j - \frac{1}{3} \delta_{ij} \rangle, \quad (5.8)$$

en donde n_{\perp} es el índice de refracción perpendicular al campo director y A es una constante que incluye las contribuciones de la birrefringencia inducida y de la birrefringencia intrínseca (Δn). Los paréntesis, $\langle \dots \rangle$ en la expresión anterior, denotan el promedio sobre todas las alineaciones posibles de \vec{n} .

Regresando al modelo discutido en el capítulo anterior, se tiene que el campo óptico incide en forma oblicua a las placas (fig. 5.1). Si los ángulos de incidencia son grandes, que implica que el ángulo entre el vector director y el campo eléctrico es pequeño, entonces la mayor contribución a la birrefringencia inducida se debe a la diferencia entre las componentes \hat{n}_{zz} y \hat{n}_{xx} , expresándose como,

$$\hat{n}_{zz} - \hat{n}_{xx} = A(\langle n_z^2 \rangle - \langle n_x^2 \rangle). \quad (5.9)$$

En la expresión anterior, se utilizan los segundos momentos estacionarios de la distribución $P(n_{\theta_s})$ calculados en la última sección del capítulo anterior (ec.(4.62)),

para obtener una expresión de la birrefringencia inducida consistente con el modelo propuesto en el capítulo 4, estos es:

$$\begin{aligned}
 \hat{n}_{xx}(E) - \hat{n}_{zz}(E) = & A\bar{E}^4 \left[\left(\frac{B_z}{A_z} \right)^2 - \left(\frac{B_x}{A_x} \right)^2 \right] \\
 & + 2AD\bar{E}^2 \left[\frac{B_z^2}{\tau A_z^2} - \frac{B_x^2}{\tau A_x^2} + \frac{2B_z^2}{A_z + \tau A_z^2} - \frac{2B_x^2}{A_x + \tau A_x^2} \right] \\
 & + AD^2 \left(\frac{2B_z^2}{2\tau A_z + A_z^2 \tau^2} - \frac{2B_x^2}{2\tau A_x + A_x^2 \tau^2} \right) \quad (5.10) \\
 & + AD^2 \left(B_z^2 \left(\frac{1}{\tau A_z} \right)^2 - B_x^2 \left(\frac{1}{\tau A_x} \right)^2 \right).
 \end{aligned}$$

Esta es una expresión analítica para la birrefringencia inducida por las fluctuaciones superpuestas a la amplitud del campo óptico, válida solamente en las primeras etapas de la reorientación y para ángulos de incidencia rasantes a las placas. Es necesario recalcar que no se está describiendo el proceso completo de reorientación. Además existe una contribución adicional debido a los efectos hidrodinámicos que se manifiesta principalmente en el primer término del lado derecho de la expresión anterior (A_x y A_z). Los coeficientes A_x , A_z , B_x , B_z , están dados por las ecuaciones (4.48 - 4.51). D y τ son los parámetros del ruido (intensidad y tiempo de correlación).

Debido a que la constante A que aparece en esta expresión no es conocida, es preciso normalizar esta expresión con respecto a un cierto valor relevante. Para tal caso, se ha tomado a la birrefringencia evaluada en el campo crítico²,

$$E_c = \sqrt{\frac{k \pi}{\epsilon_a d}}. \quad (5.11)$$

con ϵ_a la anisotropía dieléctrica, k la constante elástica del nemático y d la separación entre las placas. Para obtener esta expresión se ha considerado que los efectos de flujo son nulos, por lo que esta expresión no depende de las viscosidades del nemático.

Así, la birrefringencia normalizada con respecto a su valor en el campo crítico es:

² Este valor se obtiene transformando las ecs. (4.29-4.31) a ecuaciones de amplitud, pero sin considerar la hipótesis de ángulos pequeños (ecs. (4.32-4.33)). Las ecuaciones resultantes se resuelven y a partir de la solución se encuentra la condición de estabilidad que determina el campo crítico.

$$\begin{aligned}
\Delta \hat{N} &= \frac{\hat{n}_{zz}(E) - \hat{n}_{zz}(E_c)}{\hat{n}_{zz}(E_c) - \hat{n}_{zz}(E_c)} \quad (5.12) \\
&= \frac{\bar{E}^4 \left[\left(\frac{B_x}{\lambda_x} \right)^2 - \left(\frac{B_x}{\lambda_x} \right)^2 \right]}{(B_x^2 - B_x^2) \left(\left(\frac{\bar{E}_x^2}{\lambda_x^2} \right) + 2D\bar{E}_c^2 \left(\frac{1}{\tau\lambda_x^2} + \frac{2}{\lambda_x + \tau\lambda_x^2} \right) + D^2 \left[\frac{2}{2\tau\lambda_x + \lambda_x^2\tau^2} + \frac{1}{\tau^2\lambda_x^2} \right] \right)} \\
&\quad + \frac{2D\bar{E}^2 \left[\frac{B_x^2}{\tau\lambda_x^2} - \frac{B_x^2}{\tau\lambda_x^2} + \frac{2B_x^2}{\lambda_x + \tau\lambda_x^2} - \frac{2B_x^2}{\lambda_x + \tau\lambda_x^2} \right]}{(B_x^2 - B_x^2) \left(\left(\frac{\bar{E}_x^2}{\lambda_x^2} \right) + 2D\bar{E}_c^2 \left(\frac{1}{\tau\lambda_x^2} + \frac{2}{\lambda_x + \tau\lambda_x^2} \right) + D^2 \left[\frac{2}{2\tau\lambda_x + \lambda_x^2\tau^2} + \frac{1}{\tau^2\lambda_x^2} \right] \right)} \\
&\quad + \frac{D^2 \left[\frac{2B_x^2}{2\tau\lambda_x + \lambda_x^2\tau^2} - \frac{2B_x^2}{2\tau\lambda_x + \lambda_x^2\tau^2} + B_x^2 \left(\frac{1}{\tau\lambda_x} \right)^2 - B_x^2 \left(\frac{1}{\tau\lambda_x} \right)^2 \right]}{(B_x^2 - B_x^2) \left(\left(\frac{\bar{E}_x^2}{\lambda_x^2} \right) + 2D\bar{E}_c^2 \left(\frac{1}{\tau\lambda_x} + \frac{2}{\lambda_x + \tau\lambda_x^2} \right) + D^2 \left[\frac{2}{2\tau\lambda_x + \lambda_x^2\tau^2} + \frac{1}{\tau^2\lambda_x^2} \right] \right)}
\end{aligned}$$

5.4 Birrefringencia inducida para 5CB.

Para graficar la ecuación (5.12) se utiliza un nemático específico; el 5CB (4-ciano-4-pentilbifenil).

Los parámetros de este nemático, así como del modelo se han tomado de las siguientes referencias: [20] y [6]. Estos son:

Coefficiente de viscosidad de Leslie, $\gamma_1 = 0.01 \frac{\text{Kg}}{\text{ms}}$.

Coefficiente de viscosidades relativas, $\lambda = -\frac{\gamma_2}{\gamma_1} = 1.09$.

Constante elástica (se ha escogido k_1), $k = 7 \times 10^{-12} \text{ N}$

Separación entre las placas, $d = 1 \times 10^{-4} \text{ m}$

Coefficiente de viscosidad de Harvard, $\nu_3 = 0.02 \frac{\text{Kg}}{\text{ms}}$.

Anisotropía dieléctrica: $\epsilon_a = n_e^2 - n_o^2 = (1.73)^2 - (1.54)^2 = 0.6213$ donde n_e y n_o son los índices de refracción paralelo y perpendicular al eje del nemático [20].

La permitividad eléctrica al vacío, $\epsilon_0 = 8.85 \times 10^{-12} \frac{\text{C}^2}{\text{Nm}^2}$

Campo crítico para el modelo $E_c = 3310.05 \frac{\text{N}}{\text{C}}$.

Los parámetros del ruido se han tomado de la referencia [42] y son:

Tiempo de correlación, $\tau = 10^{-4} \text{ s}$

Intensidad de las fluctuaciones: $D = 10^{-2} \tau E_c^2 = 10^{-6} E_c^2$.

Las gráficas que a continuación se muestran, relacionan el valor de la birrefringencia normalizada y la intensidad del campo óptico ($\sim E^2$), dada por la ec.(5.12). Esta se grafica para dos casos; en el primero no se consideran los efectos flujo, $v_x = 0$, (gráfica 1) y en el segundo caso se toman en cuenta, $v_x \neq 0$, (gráfica 2). Los valores de cada curva corresponden a diferentes ángulos de incidencia.

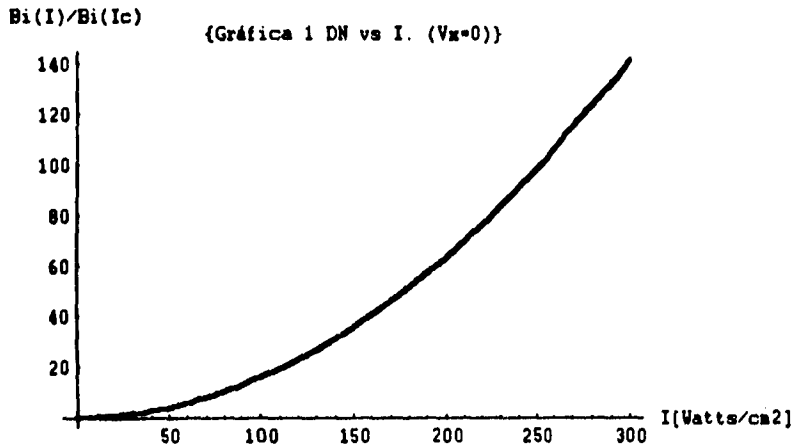


Figura 5.4: Birrefringencia normalizada vs Intensidad del campo externo. La birrefringencia se normaliza con respecto a su valor en el campo crítico y no se consideran efectos de flujo.

Como se puede apreciar en estas graficas la birrefringencia aumenta con la intensidad del campo. Para la gráfica 1, se observa que la birrefringencia es independiente del ángulo de polarización. En la gráfica 2, al considerar los efectos de flujo, se observa una disminución considerable en la birrefringencia que se puede apreciar mejor en la grafica 3. Además, se observa que conforme el ángulo de polarización aumenta, la birrefringencia disminuye con respecto a su valor en el campo crítico.

Para cuantificar la diferencia entre ambas gráficas, se grafica el cociente de la

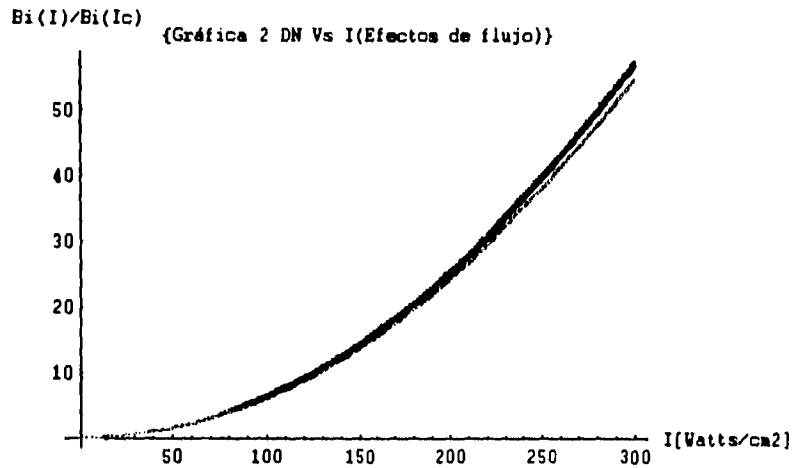


Figura 5.5: Birrefringencia vs Intensidad. En esta gráfica se consideran los efectos de flujo hidrodinámico. Como se observa, la birrefringencia disminuye con el ángulo de incidencia, aunque este cambio no es muy apreciable.

birrefringencia con efectos de flujo y sin él, esto es:

$$\frac{\Delta \hat{N}(I, \beta) (V_z \neq 0)}{\Delta N(I, \beta) (V_z = 0)}$$

Estos resultados se muestran en la gráfica 4. La expresión anterior se grafica con respecto al ángulo de incidencia y se parametriza para diversos valores de la intensidad.

Como se puede apreciar de esta gráfica los valores de la birrefringencia considerando efectos de flujo son 2.5 menores que aquellos de la birrefringencia cuando no se consideran estos efectos. Por otro lado, también de esta gráfica se puede deducir que si el ángulo de polarización es pequeño entonces no existe un cambio apreciable en la birrefringencia.

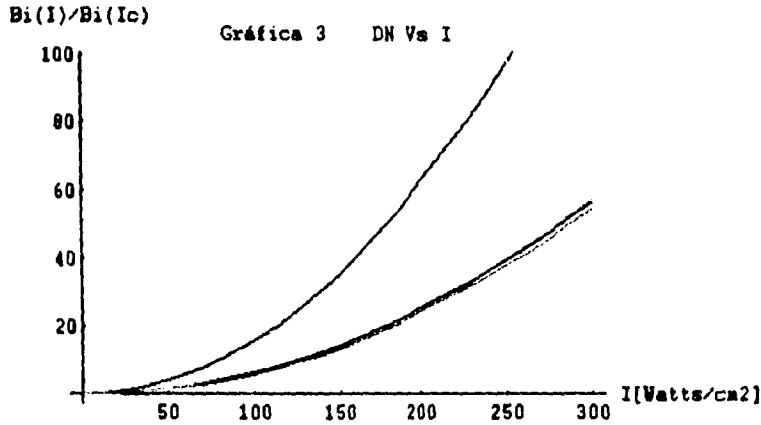


Figura 5.6: En esta gráficas las curvas de la birrefringencia con flujo y sin él en la misma escala. Nótese que la birrefringencia sin efectos de flujo es mucho mayor que la correspondiente al caso de flujo

5.5 Resultados.

En este trabajo se ha obtenido una expresión analítica para la birrefringencia inducida por un campo electromagnético fluctuante.

$$\Delta \hat{N} = \frac{\bar{E}^4 \left[\left(\frac{B_x}{A_x} \right)^2 - \left(\frac{B_z}{A_z} \right)^2 \right]}{(B_x^2 - B_z^2) \left(\left(\frac{\bar{E}_x^4}{A_x^4} \right) + 2D\bar{E}_c^2 \left(\frac{1}{\tau A_x^2} + \frac{2}{A_x + \tau A_x^2} \right) + D^2 \left[\frac{2}{2\tau A_x + A_x^2 \tau^2} + \frac{1}{\tau^2 A_x^2} \right] \right)} + \frac{2D\bar{E}^2 \left[\frac{B_x^2}{\tau A_x^2} - \frac{B_z^2}{\tau A_z^2} + \frac{2B_x^2}{A_x + \tau A_x^2} - \frac{2B_z^2}{A_z + \tau A_z^2} \right]}{(B_x^2 - B_z^2) \left(\left(\frac{\bar{E}_x^4}{A_x^4} \right) + 2D\bar{E}_c^2 \left(\frac{1}{\tau A_x^2} + \frac{2}{A_x + \tau A_x^2} \right) + D^2 \left[\frac{2}{2\tau A_x + A_x^2 \tau^2} + \frac{1}{\tau^2 A_x^2} \right] \right)} + \frac{D^2 \left[\frac{2B_x^2}{2\tau A_x + A_x^2 \tau^2} - \frac{2B_z^2}{2\tau A_z + A_z^2 \tau^2} + B_x^2 \left(\frac{1}{\tau A_x} \right)^2 - B_z^2 \left(\frac{1}{\tau A_z} \right)^2 \right]}{(B_x^2 - B_z^2) \left(\left(\frac{\bar{E}_x^4}{A_x^4} \right) + 2D\bar{E}_c^2 \left(\frac{1}{\tau A_x^2} + \frac{2}{A_x + \tau A_x^2} \right) + D^2 \left[\frac{2}{2\tau A_x + A_x^2 \tau^2} + \frac{1}{\tau^2 A_x^2} \right] \right)}$$

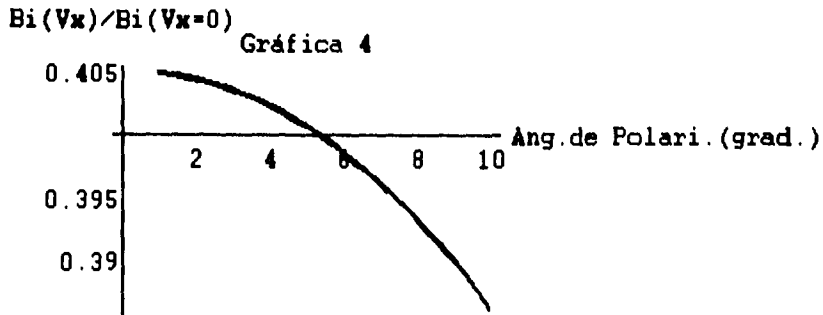


Figura 5.7: En esta gráfica se comparan los valores de la birrefringencia con efectos de flujo y sin el. Este cociente se gráfica vs el ángulo de polarización β y se observa que la birrefringencia no cambia apreciablemente.

En esta expresión, el ángulo de incidencia está implícito en los coeficientes B_x y B_z , dados por las ecs.(4.50 y 4.51).

La introducción de los efectos de flujo afecta, como es de esperar a la amplitud de Fourier de la variable n_x , por lo que se introduce un término adicional implícito en el coeficiente A_x dado por la ec.(4.38). El efecto global de estos efectos sobre la birrefringencia son, como se puede apreciar en las gráficas anteriores, una disminución considerable de la birrefringencia ($\sim 40\%$). También se observa que la birrefringencia disminuye conforme el ángulo de incidencia disminuye, pero no es muy considerable. Esto se debe a que el campo director \vec{n} debe reorientarse en una dirección más alejada de su configuración inicial por lo que la componente n_x de este campo aumenta y consecuentemente el segundo momento de la distribución $P(n_x)$.

Por otro lado, la incidencia oblicua del haz introduce un término de orden cuarto en el campo eléctrico. Este término aparece por dos razones: la primera por la aproximación a la birrefringencia que se hizo cuando se consideró solamente la contribución de las componentes paralela y perpendicular al vector director y no se consideraron los términos cruzados ($\langle n_{q_1}(t)n_{q_2}(t) \rangle$), que se obtienen de un análisis más formal del tensor dieléctrico (esto es, utilizando rotaciones de los ejes de referencia). La segunda razón es la introducción de los efectos de flujo, los cuales agregan un término adicional en el coeficiente A_2 .

Finalmente, cabe señalar que hasta donde sabemos no existe algún experimento con el cual podamos comparar este modelo.

Capítulo 6

CONCLUSIONES

Como se mencionó en la introducción, la descripción de la reorientación de un nemático por un campo óptico ha sido ampliamente estudiado; sin embargo, en la literatura existen pocos trabajos que introduzcan fluctuaciones internas o externas¹. En este sentido, este trabajo se enfoca a un problema relativamente nuevo como es la introducción de fluctuaciones externas en la amplitud del campo óptico. Más aún, también se han considerado los efectos de flujo hidrodinámico asociados a la reorientación, que tampoco es muy usual en la literatura.

La aportación principal de este trabajo consistió en deducir una expresión analítica para la birrefringencia inducida por éstas fluctuaciones, la cual es válida sólo para las primeras etapas del proceso de reorientación. Esta expresión se obtiene a partir de un modelo simple que considera los efectos del flujo hidrodinámico asociados a la reorientación y que bajo ciertas aproximaciones, como el *acoplamiento mínimo* y la suposición de *ángulos pequeños*, es relativamente *fácil* de tratar. Cabe mencionar que estas aproximaciones son comunes en la literatura, debido a que la descripción completa del proceso de reorientación involucra ecuaciones dinámicas que son altamente no lineales.

Una característica esencial del modelo propuesto es que permite introducir a las fluctuaciones en forma aditiva y cuadrática dentro de las ecuaciones nematodinámicas. Esto es posible gracias a la suposición de ángulos pequeños que se efectúa en el

¹En la mayoría de estos estudios las fluctuaciones se incorporan como ruido térmico

término de interacción del campo óptico con \vec{n} , ecs. (4.32) -(4.33), y que permite introducir al ruido en forma aditiva conservando su carácter cuadrático. De otra forma las fluctuaciones entran en forma multiplicativa en las ecuaciones nematodinámicas complicando demasiado el problema ². Por otro lado, debido a que el ruido externo es no lineal, es necesario modelarlas por un *ruido de color*³, que en este caso se escogió como un proceso de Ornstein-Uhlenbeck. De esta forma el introducir *ruido de color* enriquece el problema, ya que en este caso es posible tener control sobre los parámetros del ruido como son su tiempo de correlación e intensidad, haciendo posible su implementación experimental a través de un generador de ruido que introduzca y controle las fluctuaciones en la amplitud del campo óptico.

Así, la expresión de la birrefringencia calculada es aquella que solamente es inducida por las fluctuaciones en la amplitud del campo electromagnético. Esta expresión presenta otra limitación: sólo es válida para campos electromagnéticos que inciden en forma rasante a las placas (el ángulo entre la normal a las placas y \vec{k} es muy grande), o bien para valores de β (ángulo de polarización del campo dentro del nemático) pequeños.

La expresión así obtenida se grafica utilizando los parámetros materiales del 5CB (4-ciano-4- Pentilbifenil). Para la gráfica 1 del capítulo 5, se desprecian los efectos de flujo hidrodinámico en la birrefringencia inducida. En esta gráfica encontramos que al no existir efectos de flujo hidrodinámico la birrefringencia es independiente del ángulo de incidencia. Esto es consecuencia natural del modelo que se planteó, ya que el restringirnos a ángulos de incidencia pequeños implica que las torcas ejercida por el campo óptico sobre el vector director es pequeña y por tanto la orientación de este no se aleja mucho de su configuración inicial. De esta forma el campo director no siente una gran diferencia entre los diversos valores de los ángulos de incidencia del campo óptico.

En la gráfica 2 del capítulo 5, se consideran los efectos de flujo hidrodinámico. En esta gráfica se encuentra que los valores de la birrefringencia con efectos de flujo son

²Se obtiene una ecuación de Fokker-Planck que no permite obtener información sobre los momentos de distribución en el límite estacionario.

³Como se menciono en el capítulo 3, la aproximación de ruido blanco pierde sentido en el caso de ruido no lineal

menores que los correspondientes valores de la birrefringencia sin efectos de flujo. Por otro lado, esta gráfica muestra que la birrefringencia disminuye conforme el ángulo de incidencia del campo óptico aumenta. Esto se puede interpretar físicamente si visualizamos al flujo de corte como un agente que ayuda al proceso de reorientación *empujando* al campo director del nemático en dirección del campo externo y por tanto incrementando el valor de la componente n_x y consecuentemente las fluctuaciones en la dirección de n_x . Por esta razón, la birrefringencia tiende a disminuir aun más conforme el ángulo de polarización aumenta, entonces el valor de la birrefringencia disminuye, aunque no es tan apreciable. Esto refuerza la imagen que se tiene del modelo, ya que conforme β aumenta las moléculas del nemático sienten una torca mayor y por tanto el campo director incrementa su componente en x , de tal forma que \vec{n} se encuentre paralela a el campo eléctrico.

Al graficar el cociente de las birrefringencias con flujo contra el ángulo de polarización se observa que la birrefringencia no cambia apreciablemente, por lo que el efecto del ángulo de incidencia en este modelo es despreciable. También de esta gráfica podemos inferir que los efectos de flujo contribuyen bastante ya que tienden a disminuir el valor de la birrefringencia en un 40 % (gráfica 3).

Sería deseable poder comparar nuestros resultados con algún experimento o simulación pero, hasta donde sabemos, no existen este tipo de resultados, por lo que este modelo puede ser una propuesta para realizar tal experimento. Sin embargo, consideramos que debe ser difícil de realizarlo, ya que generalmente las mediciones se efectúan considerando todo el proceso de reorientación y no las etapas transitorias.

Resumiendo. Este modelo aunque idealizado en diversos aspectos, permite dar una primera aproximación a la descripción completa del proceso de reorientación en donde se incluyan las fluctuaciones superpuestas a la amplitud de los campos ópticos, que como se ha mostrado en las gráficas aportan contribuciones considerables. Estas contribuciones deben de tomarse en cuenta ya que cada vez se requiere de estudios más completos que permitan aprovechar al máximo este tipo de materiales en aplicaciones tecnológicas.

El modelo es susceptible de ser mejorado; por un lado se pueden considerar ángulos de incidencia que no sean tan grandes, esto debe resultar de un análisis más completo

de las componentes del tensor de índice de refracción. También puede ser posible estudiar este problema sin la restricción de ángulos pequeños para el campo director, en este caso el ruido externo entraría en forma multiplicativa y en este caso la ecuación de Fokker-Planck obtenida por el método de San Miguel y Sagués no aporta información en el límite estacionario, por lo que habría que calcular tiempos característicos del proceso de reorientación como el tiempo medio de primer paso. En fin el problema se puede enriquecer bastante y podría ser empleado, (aunque sea a nivel teórico), para ciertas aplicaciones de los cristales líquidos como por ejemplo "moduladores de señales en fibras ópticas", ya que es un material con el cual se puede producir cambios en la birrefringencia con campos externos pequeños (efecto Kerr) y de esta forma se puede modular la fase de el haz que viaja a través de la fibra óptica. Más aún, si consideramos que las señales en muchos casos presentan ruido, entonces el problema puede ser un primer paso en esta dirección.

Por último, deseo señalar que este es un problema bastante bonito e interesante ya que a través de un modelo "simple" se mezclan diversas áreas de la física⁴, como lo son la hidrodinámica de fluidos convencionales, la mecánica estadística, la termodinámica irreversible, el electromagnetismo y la óptica no lineal. Además, la introducción de las fluctuaciones lleva al problema a áreas poco estudiadas como son los procesos estocásticos.

⁴Que hasta cierto punto son desconocidas o relegadas en los cursos que se imparten en la Facultad de Ciencias de la UNAM.

BIBLIOGRAFIA

- [1] de Gennes, P.G., The Physics of the Liquid Crystals (Oxford University Press, Oxford, 1974)
- [2] Chandrasekhar S., Liquid Crystals (Cambridge University Press, Cambridge, 1977)
- [3] Vertogen, G. y de Jeu, W.H., Thermotropic Liquid Crystals, Fundamentals (Springer-Verlag, Berlin, 1988)
- [4] Birendra Bahadur, Liquid Crystals, Applications and Uses (World Scientific, Singapore, 1990)
- [5] I. Janossy, editor, Optical Effects in Liquid Crystals (Kluwer Academic Publishers, Milan, 1991)
- [6] Kelker, M. y Hatz, R., Handbook of Liquid Crystals (Weinheim, Deerfield: Verlag Chemie, Berlin, 1980)
- [7] Friedel, G. *Ann. Phys* **18**, 273, (1922); también se puede consultar Chistiakov, I., G., *Sov. Phys. Usp.* **9**, 551 (1967)
- [8] Leslie, F.M., *Quart. J. Mech. Appl. Math.* **19**, 357 (1966)
- [9] Parodi, O.J., *Phys. (Fr.)* **31**, 581 (1970)
- [10] Ericksen, J.L., *Phys. Fluids* **9**, 1205 (1966)
- [11] Maier, W. Saupe, A. Z., *Z. Natur.* **A13**, 564, (1958)

- [12] Brand, H. y Pleiner, H., *J. Physique* **41**, 553, (1980)
- [13] Frank, F.C., *Discuss. Faraday Soc.* **25**, 19, (1958)
- [14] Saupe, A., *Z. Naturforsch.* **15a**, 815, (1960)
- [15] Freedericksz, V.K. y Zolina, V. J. R. F., (*Kharkov Phys.* **62**, 457 (1969)
- [16] Zel'dovich B. Ya., Tabiryan, N.V. y Chilingaryan, Yu. S. *Sov. Phys. JETP* **54**, 32 (1981)
- [17] Zolot'ko A. S., Kitaeva V. F., Kroo, N., Sobolev, N. N. y Chillang, L., *Pis' ma Zh. Eksp. Teor. Fiz.* **32**, 170, (1980) Este artículo se puede encontrar en el libro de Janossy [5]
- [18] Khoo, I. C., *Phys. Rev. A* **23**, 2077 (1981)
- [19] Caillang, L., Janossy, I., Kitaeva V. F. y Kroo, N., *Mol. Cryst. Liq.*, **84**, 125 (1982)
- [20] Durbin, S.D., Arakelian, S.M. y Shen, Y.R., *Phys. Rev. A*, **47**, 1411, (1981)
- [21] Ong, H.L., *Phys. Rev. A*, **28**, 2393 (1983)
- [22] San Miguel M. y Sagués F., *Phys. Rev. A*, **36**, 1883, (1987)
- [23] Arfken G., Mathematical Methods for Physicists (Academic Press, New York, 1985)
- [24] De Groot S.R. y Mazur P., Non-Equilibrium Thermodynamics (Dover, New York, 1984)
- [25] Landau, L.D. y Lifshitz, E. M., Fluid Mechanics (Pergamon Press, London, 1989)
- [26] Fowles, G.R., Analytical Mechanics (Holt Rinehart and Winston Inc. New York, 1962)

- [27] Forester, D., Lubensky, T., Martin, P., Swift, J. y Pershan, P.J., *Phys. Rev. Lett.* **26**, 1016 (1971); Martin, P.C., Parodi, O. y Pershan, P.J., *Phys. Rev. A* **6**, 2401 (1972)
- [28] Sancho J.M. y San Miguel M., *Z. Physik B*, **36**, 357, (1980)
- [29] Haken, H., Sinergetics (Springer-Verlag, New York, 1983)
- [30] Pesquera, L. y Rodríguez M.A. editores, Stochastic Processes in Applied Physics Proceedings of the International School held in Santander, Spain, 10-14 September 1984. (World Scientific, Singapore, 1984)
- [31] Van Kampen, N. G., *Stochastic Processes in Physics and Chemistry*, North-Holland (1981)
- [32] De Kepper, P. y Horsthemke, W., *C.R. Acad. Sci Paris Ser. C* **287**, 251, (1978)
- [33] Kai, S., Kai, T., Takata, M. y Hirakawa, K. *J. Phys. Soc. Jpn.* **47**, 1379, (1979)
- [34] Kabashima, S., Kogure, S., Kawakubo, T. y Okada, T., *J. Appl. Phys.*, **50**, 6296, (1979)
- [35] Gollub, J.P. y Steinman, J.F., *Phys. Rev. Lett.* **45**, 551 (1980)
- [36] Lugiato, L.A., y Horowicz, R.J., *J. Opt. Soc. Am.B* **6**, 971 (1985)
- [37] Arnold, L., Horsthemke, W. y Lefever, R., *Z. Physik B* **29**, 367 (1978)
- [38] Kithara, K., Horsthemke, W. y Lefever, R., *Phys. Lett.* **70 A**, 377 (1979)
- [39] Gardiner, C.W., Handbook of Stochastic Methods for Physics, Chemistry and the Natural Sciences (Springer-Verlag, Berlin, 1985)
- [40] McQuire, D.A., Statistical Mechanics (Harper and Row, New York, 1976)
- [41] Novikov, E.A., *Soviet Phys. JETP* **20**, 1290 (1965)
- [42] San Miguel M. y Sancho J.M., *Z. Phys. B* **43**, 361 (1981)

- [43] Arecchi, F.T. y de Giorgio V., *Phys Rev. A* **3**, 1108 (1971)
- [44] San Miguel, M. y Sagués, F., *Phys. Rev. A* **33**, 2769, (1986)
- [45] Sagués, F. y San Miguel, M., *Phys. Rev. A* **32**, 1843 (1985)
- [46] Horsthemke, W. y Doering C.R., *Phys. Rev. A* **31**, 1123 (1985)
- [47] Kawakubo, T., Yanagita, A. y Kabahima, S., *J. Phys. Soc. Jpn.* **50**, 1451 (1981)
- [48] Yamamoto, R., Ishihara, S., y Hayakawa, S., *Phys. Lett.* **60A**, 5 (1977)
- [49] Schadt, M., *J. Chem. Phys.* **1**, 210 (1977)
- [50] Hecht E. y Zajac A. Optics (Addison-Wesley, Reading Massachusetts, 1977)
- [51] Doi M. y Edwards S. The Theory of Polymer Dynamics (Oxford University Press, Oxford, 1986)