



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO

FACULTAD DE CIENCIAS

**TEXTURAS COLESTÉRICAS CONFINADAS
ENTRE PLACAS PARALELAS SOMETIDAS A
ANCLAJE DÉBIL BAJO UN CAMPO ELÉCTRICO**

T E S I S

QUE PARA OBTENER EL TÍTULO DE:

Físico

PRESENTA:

Oswaldo Adapta García

DIRECTOR DE TESIS:

Dr. Juan Adrián Reyes Cervantes



Ciudad de México, México

2018



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.

1. Datos del alumno

Adapta

García

Oswaldo

55 78 53 17 97

Universidad Nacional Autónoma de México

Facultad de Ciencias

Física

413011613

2. Datos del tutor

Dr.

Juan

Adrián

Reyes

Cervantes

3. Datos del sinodal 1

Dr.

Gerardo

Ruíz

Chavarría

4. Datos del sinodal 2

Dr.

Omar Guillermo

Morales

Saavedra

5. Datos del sinodal 3

Dr.

Arturo

Rodríguez

Gómez

6. Datos del sinodal 4

M. en C.

José Luis

Del Río

Valdés

7. Datos del trabajo escrito

Texturas colestéricas confinadas entre placas paralelas sometidas a anclaje débil bajo un campo eléctrico.

92 p

2018

Esta tesis es dedicada a mi familia.

Por orden de aparición:

A mis padres: Irais y Felix,
y a mis hermanos: Liz y Ariel.

«Sabía, aunque cualquiera hubiese podido percibirlo en la magia de aquella plácida respiración, que el período obedecía a la relación entre la raíz cuadrada de la longitud del hilo y ese número “pi” que, irracional para las mentes sublunares, por divina razón vincula necesariamente la circunferencia con el diámetro de todos los círculos posibles, por lo que el compás de ese vagar de una esfera entre uno y otro polo era el efecto de una arcana conjura de las más intemporales de las medidas, la unidad del punto de suspensión, la dualidad de una dimensión abstracta, la naturaleza ternaria de él, el tetrágono secreto de la raíz, la perfección del círculo.»

El péndulo de Foucault, Umberto Eco

Agradecimientos

El trabajo que a continuación presento, no hubiera sido posible sin el apoyo incondicional del Dr. Juan Adrián Reyes Cervantes. Mi total gratitud por su tiempo, dedicación y paciencia, además de las muchas discusiones para la realización de la presente tesis.

Agradezco a mi familia, a mi amorosa y optimista madre Irais que nunca perdía la esperanza en mi, cuando yo lo hacía, y quien me dio la libertad de equivocarme tantas veces hasta lograr encontrarme; a mi padre Felix, héroe de infancia y de toda la vida, por aventurarse a migrar y enseñarme que el amor es un acto silencioso, presente todo el tiempo en diferentes formas; a mis hermanos Liz y Ariel, compañeros de batalla, crecer a su lado ha sido lo mejor de la vida; a mis abuelos Belén y Elias, que ya no están pero tengo presentes perpetuamente.

A mi fraternidad, por su amor absoluto, por enseñarme a vivir; a mi padrino Raúl por esas horas y horas de pláticas de café que me regresaban a la realidad. A todos mis compañeros y amigos de la Facultad, es especial a mi amigo Alejandro, por esos momentos inolvidables a lo largo de la carrera, gracias por nuestra amistad.

A mis profesores, por enseñarme el amor a la ciencia, a la literatura y a la libertad de pensamiento. En especial a aquel profesor que me enseñó los poemas de Jorge Luis Borges y León Felipe.

A todos aquellos científicos, que construyeron el enorme edificio del conocimiento de la física y la matemática para poder admirarlo.

Agradezco al IPN, al INBA, a la Facultad de Ciencias de la UNAM y al Instituto de Física por permitirme saber un poco más.

Agradezco a mis sinodales el tiempo y dedicación para la revisión y corrección de este trabajo: Dr. Gerardo Ruiz Chavarría, Dr. Omar Guillermo Morales Saavedra, Dr. Arturo Rodríguez Gómez y al M. en C. José Luis del Río Valdés.

Finalmente agradezco al CONACyT por el apoyo otorgado a lo largo de este trabajo.

Índice general

Resumen	II
Introducción	III
1. Mesofases	1
1.1. Introducción a los Cristales Líquidos	1
1.2. El Descubrimiento de los Cristales Líquidos	1
1.3. Descripción básica de los Cristales Líquidos	2
1.4. Densidad de Energía Libre	6
2. Cálculo de Variaciones	11
2.1. Breve Introducción al Cálculo de Variaciones	11
2.2. Condiciones de Frontera Fijas: Anclaje Fuerte	12
2.3. Condiciones de Frontera Variables: Anclaje débil.	21
3. Energía Libre en Presencia de Campos Externos	23
3.1. Densidad de Energía en Presencia de Campos Eléctricos y Magnéticos.	23
3.2. Transición de Fredericksz	26
3.2.1. Longitud de Coherencia	30
4. Ecuaciones de Equilibrio	32
4.1. Ecuaciones de equilibrio para la fase colestérica	34
4.1.1. Aproximación a Anclaje fuerte mediante Anclaje débil. . .	43
4.2. Determinación del Campo Eléctrico Umbral ζ_0	57
5. Resultados	61
Conclusiones	75
Apéndice	77
Bibliografía	83

Resumen

En el presente trabajo de tesis investigamos las posibles configuraciones de equilibrio para Cristales Líquidos (CL), en particular para la fase colestérica confinada entre placas paralelas con anclaje débil sometida a un campo eléctrico externo perpendicular a ellas. Al minimizar la densidad de energía de Frank-Oseen (FO), densidad que determina el estado de deformación de la fase colestérica la cual se desarrolla a lo largo del eje Z , obtenemos configuraciones de mínima energía las cuales corresponden a configuraciones de equilibrio. Proponemos una metodología para solucionar las ecuaciones diferenciales producto de minimizar la densidad de energía de FO. Tanto las condiciones planares de anclaje débil como la simetría del campo eléctrico externo aplicado a las placas paralelas, permite escribir las ecuaciones diferenciales correspondientes como un sistema de ecuaciones integrales acopladas. Sobre las placas definimos condiciones planares que establecen una dirección unitaria \mathbf{n}_0 específica que obliga a la dirección local del alineamiento promedio de las moléculas de la fase N^* (representada por un vector unitario \mathbf{n}), a alinearse con ella en las fronteras, es decir, sobre las placas paralelas. Existen dos opciones, o bien estas direcciones se alinean de manera paralela o perpendicular, o bien forman un ángulo entre ellas representado por $\mathbf{n} \cdot \mathbf{n}_0 = \cos \gamma$; la primera opción se representa como condiciones fijas a la frontera (o anclaje fuerte) y la segunda como condiciones variables (o anclaje débil). Es posible hacer una aproximación al límite de anclaje fuerte mediante anclaje débil cuando la razón entre la energía de superficie y la energía de bulto $w^* \rightarrow \infty$, bajo esta condición investigamos como se desarrolla la fase N^* al variar la intensidad del campo eléctrico externo y esperamos que debido a la aproximación al límite de anclaje fuerte $\gamma \sim k\pi$, con k entero.

Concluimos en esta breve investigación que es necesario imponer condiciones de frontera fuertes de manera externa, pues por debajo del campo eléctrico crítico y para anclaje débil encontramos configuraciones cónicas-focales; por arriba del campo crítico y para anclaje fuerte obtenemos configuraciones colestéricas (N^*) que se desenrollan en nemáticas (N).

Introducción

En los últimos años las aplicaciones de los Cristales Líquidos han ido en aumento, como por ejemplo en dispositivos de visualización, el más común de ellos las pantallas LCD (Liquid Crystal Display). Los cristales líquidos se utilizan para modular la luz incidente debido a los efectos electro-ópticos que ocurren dentro de las muestras de cristal líquido, las cuales funcionan a bajos voltajes ($\sim \mu V$) lo que minimiza el consumo de energía de ciertos dispositivos electrónicos. Es posible la modulación de la luz incidente sobre las muestras también por la anisotropía que presentan los cristales líquidos, las propiedades anisotrópicas se deben a la forma de las moléculas alargadas y sus enlaces químicos rígidos de algunos de ellos, además de su orden de largo alcance entre las orientaciones promedio de las moléculas, que mediante la aplicación de un campo eléctrico externo la orientación promedio de las moléculas cambia a causa de la anisotropía dieléctrica del medio mesofásico, esta reorientación debida a la influencia de un campo eléctrico externo se vuelve visible a causa de esta anisotropía óptica que presenta el material [1]. En la actualidad debido a sus propiedades electró-ópticas existen tecnologías basadas en una clase particular de cristales líquidos conocidos como *Colestéricos* (N^*) o *Nemáticos quirales*, quirales pues su imagen especular no coincide con su imagen real, estos son utilizados en rejillas de difracción intercambiables, lentes con transparencia controlada por voltaje, dispositivos de direccionamiento de haces (beam-steering) etc. La comprensión de las estructuras orientacionales en los cristales líquidos colestéricos y las transiciones que ocurren por perturbaciones externas ya sea mecánicas, eléctricas o magnéticas, son de importancia teórica y práctica. Cuando un campo externo interactúa con un medio dieléctricamente anisotrópico este puede modificar los puntos de transición de fase, cambiar los parámetros de orden o inducir una nueva simetría, es decir, influye en la estructura y las propiedades termodinámicas del medio, tales fenómenos deben distinguirse de los efectos del campo relacionados con la reorientación promedio de las moléculas que se acompaña de cambios fuertes en las propiedades ópticas de los cristales líquidos [2].

Poco después del descubrimiento de los cristales líquidos y de establecer teorías de la elasticidad para describir el comportamiento orientacional de estas sustancias orgánicas, se desarrollo un trabajo intenso sobre los efectos que sufren los cristales líquidos mediante la aplicación de campos externos. Las primeras investigaciones

sobre las interacciones entre campos eléctricos y magnéticos con cristales líquidos colestéricos mostraron que para campos suficientemente fuertes el paso de la hélice, es decir, el giro de la dirección promedio de las moléculas de una capa a otra formando una espiral ascendente hasta regresar a la misma dirección también conocido como el pitch (p) se desenrolla provocando una transición de la fase colestérica a la nemática (Ch-N) [3, 4, 5]. Posteriormente las variaciones pronosticadas entre el pitch y el campo aplicado se observaron experimentalmente. [6, 7, 8]

En trabajos sobre los parámetros de control de la configuración colestérica se enfatiza que tales parámetros de la transición Ch-N no depende de la temperatura, sino de un campo de origen mecánico, eléctrico o magnético. El radio de confinamiento $w = d/p$ (donde d es el espesor de la muestra) es el principal parámetro de control que caracteriza la acción mecánica de las dos superficies que limitan la muestra mientras que los campo externos actúan como parámetros de control adicionales. [9]

Las investigaciones realizadas muestran que tanto la anisotropía dieléctrica del medio (positiva o negativa) como el radio de confinamiento influyen de manera importante en la configuración de la fase colestérica confinada entre placas paralelas ya que bajo la influencia de un campo eléctrico (paralelo al eje helicoidal) y el giro a causa de la quiralidad (que es inversamente proporcional a p) se ha observado el desarrollo de diferentes texturas [10, 11, 12]. Las muestras de cristal líquido sometidas a condiciones fijas o variables en la frontera sobre las placas que confinan las muestras de cristal líquido juegan un papel importante en el desarrollo de las configuraciones de los sistemas mesafásicos, ya que además de observarse contracciones o dilataciones en el pitch de la fase colestérica a consecuencia de la aplicación externa de campos, eléctricos principalmente, dan pie a una serie de diferentes estructuras y transiciones de fase no solo la transición Ch-N. [13, 14, 15, 16]

El objetivo del trabajo de tesis aquí presentado es encontrar como varía la dirección local promedio de alineación de la fase colestérica confinada entre placas paralelas sometidas a condiciones de frontera mediante una aproximación de anclaje débil al límite de anclaje fuerte, bajo la aplicación de un campo eléctrico externo perpendicular a las placas, desde la perspectiva de su *espacio fase*, para ello este trabajo consta de 5 capítulos y una sección donde exponemos las conclusiones de esta investigación. En el capítulo 1 presentamos una breve introducción histórica sobre el descubrimiento de las fases mesomórficas o cristales líquidos, además de una descripción básica de las propiedades para algunas de las mesofases más comunes: Nemática (N), Colestérica o nemática quiral (N^*) y Esméctica (S). Posteriormente establecemos una relación matemática para la fase nemática y colestérica, mediante la densidad de energía Frank-Oseen (FO) la cual describe la deformación elástica que sufre la dirección promedio molecular a una temperatura constante, es decir, trabajaremos con una descripción isotérmica del medio. También presentamos una interpretación geométrica de las constantes elásticas

de Frank [17]. La fase N^* será de principal interés en este trabajo. En el capítulo 2 presentamos una breve introducción al cálculo de variaciones para medios continuos. La descripción del estado de deformación lo determinamos en el capítulo anterior mediante la densidad de energía de FO la cual determina el estado de deformación elástica, esta densidad de energía corresponde a configuraciones de equilibrio, buscamos minimizar la densidad de energía de FO con la herramienta del cálculo de variaciones, ya que las configuraciones de equilibrio ocurren justamente cuando la densidad de FO es mínima, este proceso implica utilizar las ecuaciones de Euler-Lagrange (EL) aplicadas a medios continuos. La descripción de los estados de equilibrio necesitan establecer las condiciones de frontera, para ello analizamos el caso de condiciones de extremos fijos (Anclaje fuerte) y también las condiciones de extremos variables (Anclaje débil). Las descripciones del estado de deformación de la fase colestérica corresponde a la teoría continua estática de cristales líquidos [18].

En el capítulo 3 analizamos los efectos de campos externos sobre las muestras de cristales líquidos. Estos campos tratan de alinear las muestras iniciando así una competencia entre la dirección promedio de las moléculas en la frontera y la dirección del campo aplicado, de esta manera es necesario encontrar la orientación promedio de las moléculas ahora en presencia de campos externos (eléctricos o magnéticos), lo que da como resultado un término adicional de superficie a la densidad de energía libre total de FO. Analizamos la transición de Fredericksz la cual ocurre en la fase nemática, ella establece el campo magnético adimensional crítico o umbral en el que la dirección promedio de las moléculas sufre una reorientación, también discutimos sobre la longitud de coherencia la cual mide la distancia en la que el director \mathbf{n} comienza a variar en presencia del campo hasta que este se alinea con el campo [19]. Para este trabajo analizamos los efectos de un campo eléctrico paralelo al eje helicoidal de la fase colestérica.

Para el capítulo 4 proponemos una forma vectorial para la dirección local del alineamiento promedio de las moléculas, \mathbf{n} (campo director unitario) que depende explícitamente de la coordenada z (paralela al eje de la hélice χ) y perpendicular a las placas paralelas que confinan la fase N^* donde existe la configuración de la fase. La densidad de energía total depende explícitamente de este campo director, dando como resultado una forma funcional escalar. Mediante las ecuaciones de equilibrio que resultan del proceso de minimización, encontramos constantes de equilibrio (análogas a las constantes de movimiento en la mecánica clásica) y la simetría del campo eléctrico externo perpendicular a las placas nos permiten construir un *sistema de ecuaciones integrales de equilibrio*, el cual escribimos en términos de sus parámetros adimensionales. Sobre las placas paralelas imponemos una dirección de tendencia \mathbf{n}_0 , paralela a las placas, en la dirección X , es decir *condiciones planares* sobre la muestra. Como consecuencia de aproximar el anclaje débil al fuerte se establecen condiciones aproximadamente fijas sobre las fronteras, estas condiciones a su vez permiten modificar el sistema de ecuaciones que imponen períodos caracterizados por números enteros n , m_ϕ para el ángulo

de inclinación θ y ϕ respectivamente a lo largo del eje Z . Proponemos una estrategia para resolver el sistema resultante con un radio de confinamiento fijo w y las constantes elásticas de Frank para la fase N , 5CB. Al final de este capítulo desarrollamos el cálculo para encontrar el campo umbral adimensional de la fase colestérica, similar al cálculo para encontrar el campo umbral de la transición de Fredericksz.

En el capítulo 5 exponemos los resultados obtenidos utilizando la metodología descrita en el capítulo anterior, las soluciones del sistema de ecuaciones integrales se resuelven mediante el método de Newton-Raphson (NR). Una vez obtenida una solución del sistema para un valor del campo eléctrico dado, variamos la intensidad del campo provocando un reajuste en los parámetros el cual es necesario para que en el sistema sigan cumpliéndose las condiciones de frontera, por medio de este proceso encontramos un conjunto de soluciones particulares, a continuación graficamos la variación de los parámetros contra el campo eléctrico externo adimensional correspondiente a cada solución del sistema de ecuaciones. Construimos la función del ángulo de inclinación $\theta = \theta(\xi)$, esta función depende de la variable ξ donde se desarrolla la textura colestérica a lo largo de Z , de esta manera es posible observar la variación de las amplitudes de oscilación a causa de las variaciones de la intensidad del campo eléctrico adimensional aplicado a lo largo de la muestra. Observamos que a pesar de tener una aproximación al anclaje fuerte las soluciones se configuran para anclaje débil, calculamos el valor del campo umbral ζ_0 , y observamos que para valores superiores a dicho campo las curvas del espacio fase adquieren el anclaje fuerte esperado.

Finalmente discutimos los resultados obtenidos. Concluimos con una discusión sobre las limitaciones que encontramos a lo largo de este trabajo, sus posibles extensiones y perspectivas para futuras investigaciones.

Capítulo 1

Mesofases

1.1. Introducción a los Cristales Líquidos

Cuando observamos la naturaleza es común que identifiquemos tres estados de agregación de la materia o fases, a saber, sólido, líquido y gaseoso, algunos compuestos como el agua presentan todos estos estados a diferentes temperaturas. Sabemos que el agua se encuentra en estado sólido cuando la temperatura está bajo los 0°C , de forma líquida entre 0°C y 100°C , y gaseosa cuando la temperatura pasa de los 100°C . Sin embargo existen materiales que no se ajustan a esta clasificación. Una sustancia se llama isotrópica cuando sus propiedades físicas no dependen de la dirección en la que son estudiadas, pues ciertas magnitudes vectoriales medibles dan resultados idénticos independientemente de la dirección elegida para dicha medida. El agua a temperatura ambiente es un ejemplo de un líquido isotrópico, sin embargo algunas sustancias orgánicas como los CL presentan anisotropía pues sus propiedades físicas son diferentes para diferentes direcciones, estas sustancias son en realidad de otra clase, a esta clase de fases se les conoce como mesofases o fases mesomórficas, o simplemente como fases intermedias. Esta clasificación le permite más libertades a la materia en el sentido de que los CL, a la vez líquido puede fluir como fluido o fluido viscoso, y al mismo tiempo posee características de un cristal sólido, es decir, propiedades ópticas como birrefringencia etc. Por lo tanto al exhibir ambas características tanto de líquido como de sólido el nombre Cristal Líquido representa claramente su naturaleza, no obstante las controversias generadas por este nombre.

1.2. El Descubrimiento de los Cristales Líquidos

El descubrimiento de los CL se atribuye principalmente al botánico Austriaco F. Reinitzer [20] quien en 1888 experimentó y reportó las propiedades insólitas de ciertas sustancias que hoy conocemos como cristales líquidos. Reinitzer [18], quien trabajaba con ésteres de colesterol (5-colester-3-il benzoato) o también co-

nocido como Benzoato de Colesteril, el cual es sólido a temperatura ambiente, observó que existían dos puntos de fusión para dicha sustancia, el primero aparecía a una temperatura de $145.5^{\circ}C$ el material llegado a esta temperatura, pasaba de ser un sólido a un líquido opaco, y el segundo punto de fusión a una temperatura de $178.5^{\circ}C$, en este caso el líquido antes opaco se convertía en un líquido claro. Lo que Reinitzer encontró en el primer punto de fusión, el líquido opaco, es lo que ahora conocemos como CL Colestéricos, en ocasiones también llamados CL Nemáticos quirales (N^*). También observó un comportamiento inusual en el cambio de colores que se iban presentando en la sustancia conforme se variaba la temperatura; el color azul apareció llegando al primer punto de fusión, a continuación a un color azul-violeta brillante cuando la temperatura hizo que el líquido opaco se cristalizara. Reinitzer envió muestras de su trabajo al Físico alemán F. Lehmann, quien observó propiedades ópticas semejantes a las de los cristales, a su vez esta sustancia tenía la propiedad de fluir a la que acuñó el término “flowing crystals”, es decir cristales que fluyen, posteriormente en 1900 Lehmann establece el término general Cristal Líquido, término utilizado actualmente.

Sin percatarse por completo estos científicos estaban frente a un nuevo descubrimiento, un nuevo estado de sustancia, las cuales poseían fluidez, como cualquier líquido ordinario, y a su vez propiedades de un sólido cristalino. Los resultados publicados por Reinitzer y Lehmann interesaron a otros científicos quienes se sumaron a este nuevo descubrimiento. A principios del siglo XX, científicos como Vorländer de Halle (Alemania), preparó una centena de nuevos cristales líquidos; J. Friedel (Francia), propuso una primera clasificación de los CL; S. Oseen junto con J. Zocher, holandés y checo respectivamente, fundaron una teoría de elasticidad; y por parte de la antigua URSS en los años 30's V. K. Frederiks y V. N. Tsvetkov por primera vez realizaron investigaciones sobre las propiedades ópticas y eléctricas de los CL [20].

1.3. Descripción básica de los Cristales Líquidos

La mayor parte de los CL son sustancias orgánicas, estas sustancias pueden, de cierta manera, forzarse a exhibir fases de cristal líquido o bien variando la temperatura o bien variando la concentración en un solvente, a los primeros se les conoce como CL **termotrópicos**; a los segundos, CL **liotrópicos**. Los materiales que bajo condiciones apropiadas dan lugar a esta clase de mesofases se le conoce como **materiales mesogénicos** [18]. En este trabajo de tesis trataremos básicamente una descripción isotérmica, es decir, a una temperatura fija, en otras palabras, trabajaremos con CL termotrópicos, entendemos también por termotrópico los CL cuyas transiciones entre estados intermedios se deben únicamente a procesos térmicos. Por otra parte los compuestos de CL que pasan por una o varias mesofases antes de convertirse en un líquido isotrópico ordinario depende también

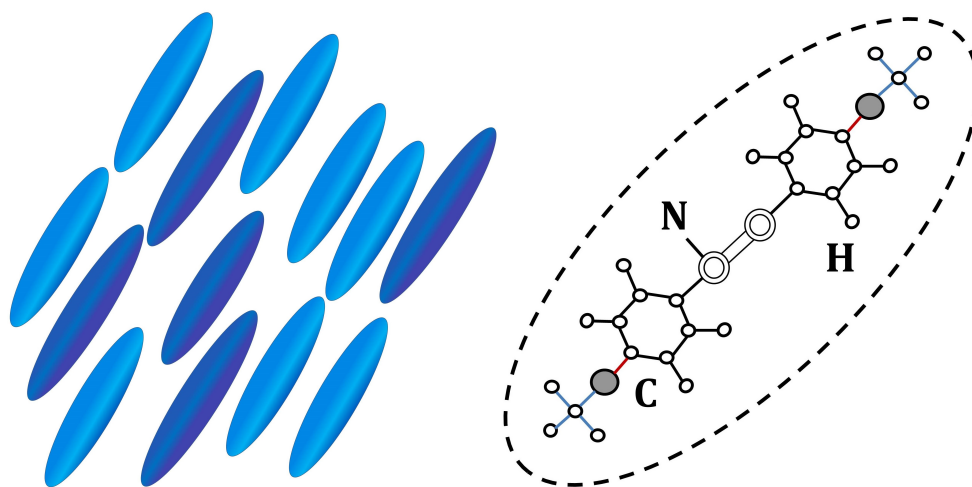


Figura 1.3.1: Representación esquemática de las moléculas alargadas (calamíticas) y su composición orgánica que yace a lo largo de la molécula.

de factores como la estructura molecular, densidad o campos electromagnéticos aplicados externamente [18].

En un cristal líquido por regla general las moléculas son altamente anisotrópicas en su forma geométrica, esta condición junto con la rigidez de sus enlaces permite que la sustancia exhiba estas fases intermedias, además de presentarse como moléculas rígidas de forma alargada (moléculas calamíticas) o como un disco (moléculas discóticas) [20].

La mayoría de los CL termotrópicos están constituidos por moléculas alargadas en forma de barra, véase la figura (1.3.1). La justificación a este modelo molecular proviene de la interacción entre los átomos neutros de las moléculas lo que provoca desplazamientos de las nubes electrónicas, en consecuencia aparecen campos eléctricos que forman dipolos eléctricos resultado del desplazamiento de las nubes de electrones de los átomos, ésta formación de dipolos conduce a que las partes del átomos con cargas opuestas se atraigan mutuamente y por lo tanto la totalidad del átomo también se atrae con otros átomos [20].

En el caso de las moléculas alargadas los átomos se sitúan a lo largo de una línea determinada como se puede ver en la figura (1.3.1), o bien permanecen en un plano para las moléculas en forma de disco, como se muestra en la figura (1.3.2)

Una vez justificado el modelo de molécula alargada con enlaces químicos rígidos, es necesaria una clasificación de los CL, ya que a pesar de que existen sustancias que comparten un estado, o una mesofase, existen características que distinguen entre sí a los diferentes CL que se presentan en la naturaleza. Los CL que presentan sus moléculas de forma alargada, de acuerdo a la clasificación realizada por Friedel, se pueden clasificar en tres grupos o mesofases: **Nemáticos**, **Colestéricos** y **Esmécticos** [21], cabe mencionar aquí que nuestro interés

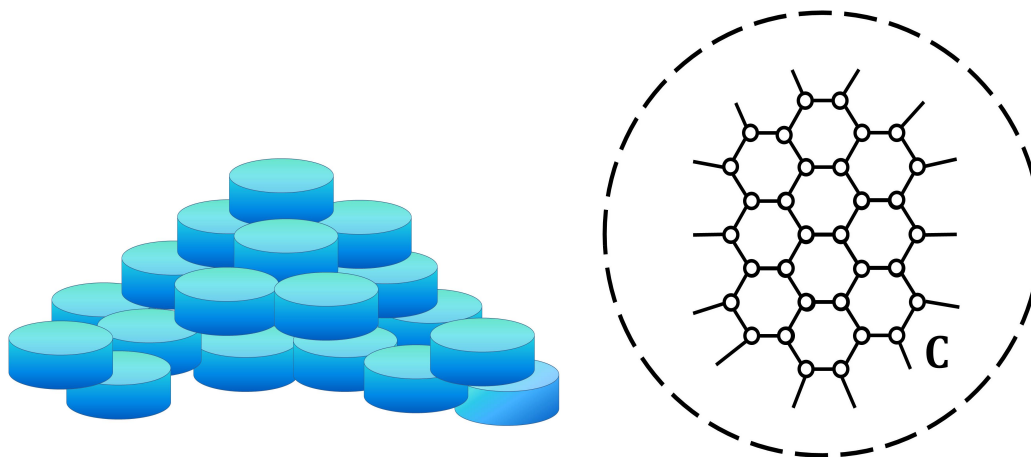


Figura 1.3.2: Representación esquemática de las moléculas en forma de discos (discóticas) y su composición orgánica que yace dentro del plano de la molécula.

será principalmente en CL termotrópicos en su fase Colestérica, ya que el desarrollo posterior estará centrado en ésta mesofase en particular. A continuación haremos una breve descripción de estos tres grupos.

Fase Nemática: Los ejes individuales de las moléculas que constituyen la sustancia, tienden a alinearse, espontáneamente, paralelas unas con otras a lo largo de una dirección preferencial (salvo fluctuaciones térmicas) como se ve en la figura (1.3.3), en la mayoría de los nemáticos esta dirección se conoce como *eje anisotrópico*. La fase nemática posee un alto grado de orden orientacional aunque no de orden traslacional, además de no existir una correlación de largo alcance entre los centro de masa de las moléculas, que le permite trasladarse libremente mientras permanezcan alineadas en promedio, paralelas una con otra, esta característica le da la posibilidad al nemático de fluir como un líquido. También existe una simetría rotacional alrededor del eje anisotrópico o director, entonces la fase nemática es *uniaxial*. Este eje uniaxial usualmente no tiene polaridad, aunque podría tenerla.

Es conveniente introducir un vector unitario \mathbf{n} , llamado el director, para describir la dirección local del alineamiento promedio de las moléculas, al no existir polaridad en el eje anisotrópico en dichas moléculas implica que \mathbf{n} y $-\mathbf{n}$ son indistinguibles, es decir no tiene relevancia física el cambio de signo.

Fase Colestérica: Debido a su estructura, la fase colestérica se conoce también como fase nemática quiral, (esto significa que su imagen especular no puede hacerse coincidir con la imagen real) aunque al igual que las moléculas en el

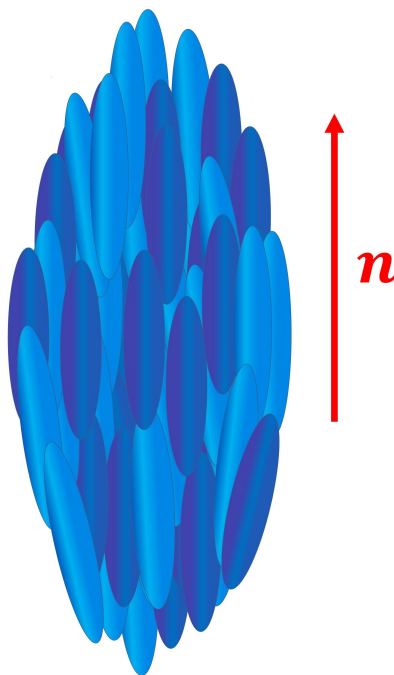


Figura 1.3.3: Arreglo molecular de la fase nemática, las moléculas se alinean en promedio con el vector director \mathbf{n} .

nemático, para la fase colestérica se consideran modelos de moléculas en forma de barra o disco. La fase colestérica puede describirse como una fase formada por una gran cantidad de capas nemáticas apiladas, sin embargo en la fase colestérica el director \mathbf{n} de estas capas realizan un giro a cierto ángulo de una capa a la otra alrededor del eje χ normal al director. La quiralidad de la molécula nos indica si la fase es de giro izquierdo o derecho, esta energía de giro es pequeña comparada con la energía total de alineamiento paralelo de las moléculas [22]. Este arreglo helicoidal exhibe propiedades ópticas como reflexión selectiva de luz polarizada circularmente y un alto poder rotativo. Las primeras investigaciones sobre CL se realizaron con ésteres de la colestérica que presentaban las características arriba descritas, de allí el nombre de *fase colestérica*. Una representación esquemática de esta fase puede verse en la figura (1.3.4)

Fase Esméctica: Son estructuras estratificadas que tienen una distancia entre capas consecutivas bien definidas además de que sus moléculas poseen orden posicional. Para cada tipo de estratificación los arreglos moleculares varían. Por ejemplo en la fase esméctica A las moléculas están ordenadas verticalmente en cada una de las capas. La atracción entre capas es relativamente débil comparada con las fuerzas de atracción que ejercen las moléculas vecinas, de allí la capacidad que tienen estas capas para deslizarse una respecto a la otra con facilidad. Por otro lado la fase esméctica C tienen un cierto grado de inclinación respecto a la

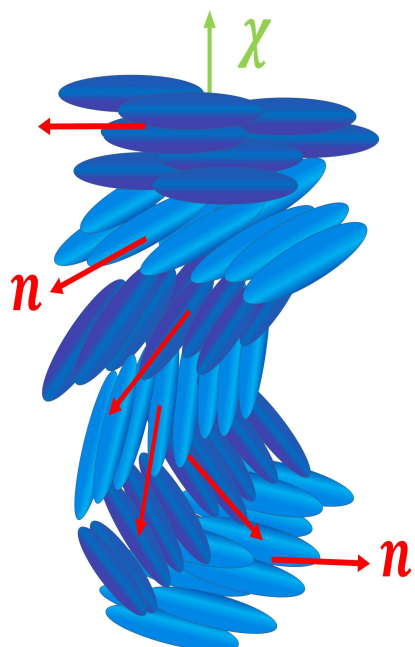


Figura 1.3.4: Arreglo molecular para la fase colestérica, el director \mathbf{n} realiza un giro de una capa a la otra alrededor del eje χ .

normal del plano de la capa. Existen otras variantes de la fase esméctica como la fase esméctica la C^* o la fase esméctica Hexática por mencionar algunas [22].

En la fase Hexática las moléculas están distribuidas en una red triangular; la fase C^* surge de agregar actividad óptica a las moléculas de la fase esméctica C provocando que las moléculas giren alrededor del eje normal a la capa obteniendo una configuración helicoidal. Una representación esquemática de esta fase puede verse en la figura (1.3.5)

1.4. Densidad de Energía Libre

La anisotropía presente en los cristales líquidos dota a estos de propiedades elásticas, eléctricas, magnéticas y ópticas. Las aplicaciones de estos materiales principalmente se basan en dichas propiedades y en como reaccionan a perturbaciones externas. Las propiedades pueden clasificarse en escalares: como los parámetros de transición termodinámicos (es decir, a las posibles transiciones de fase), y no escalares como los coeficientes dieléctricos, diamagnéticos, viscosos, ópticos y elásticos. En esta sección nos centraremos en las propiedades elásticas, mientras que en capítulos posteriores a propiedades no escalares, como dieléctricas etc.

Cuando intentamos deformar la alineación de \mathbf{n} , generamos una reacción, una fuerza restitutiva de naturaleza elástica, las constantes de proporcionalidad de

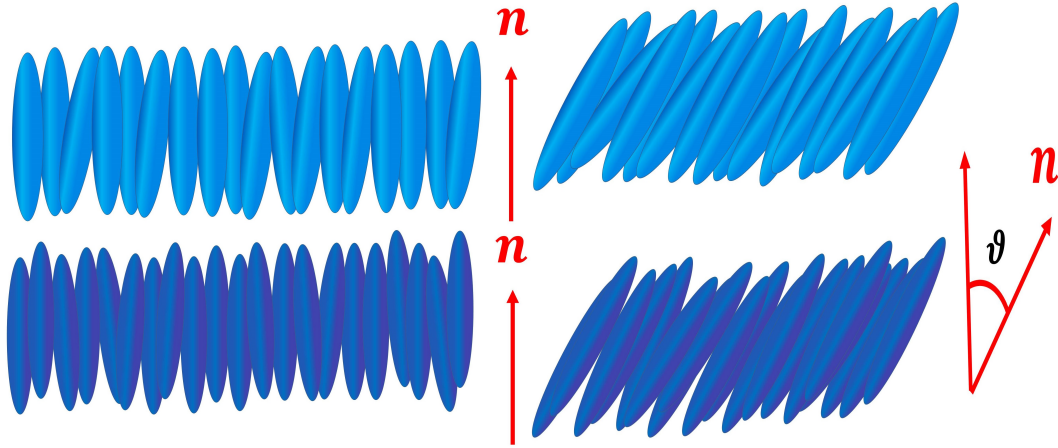


Figura 1.3.5: Arreglo molecular para: fase esméctica A (derecha), fase Esméctica C (izquierda)

los esfuerzos de deformación y restitución se conocen como constantes elásticas [22]. En el siguiente desarrollo vamos a considerar un medio débilmente deformado, deformaciones fácilmente observadas ópticamente que tiene una energía libre asociada como veremos a continuación.

Podemos describir el estado de deformación de la fase nemática o colestérica, a una temperatura fija T mediante el director \mathbf{n} . Es natural asociarle a la energía libre¹ una dependencia de deformación involucrando explícitamente el gradiente del director es decir, $\nabla\mathbf{n}$, que en componentes se escribe como $\frac{\partial n_i}{\partial x_j}$ o de manera simplificada $n_{i,j}$ [17]. Será necesario también suponer una distorsión pequeña, es decir:

$$(1.4.1) \quad |n_{i,j}| \ll \frac{1}{a},$$

donde a es el tamaño típico de la molécula, esta condición presenta varias ventajas, podemos definir una orientación $\mathbf{n}(\mathbf{r})$ tangente a cada punto \mathbf{r} , de tal manera que sea posible hacer una descripción continua del medio mesofásico [17]. En cualquier punto \mathbf{r} las simetrías que presenta la orientación del director \mathbf{n} , deberán hacerse presentes en la densidad de energía libre, que denotaremos por $f(\mathbf{r})$, la cual también debe depender explícitamente de sus derivadas $\nabla\mathbf{n}$, esta energía libre es invariante bajo cualquier cambio de orientación tanto de \mathbf{n} como de $\nabla\mathbf{n}$. Así la densidad de energía libre ya sea de la fase nemática o colestérica tiene que ser invariante bajo cualquier operación que preserve la orientación local de \mathbf{n} . Dicha condición también revela una invarianza bajo la operación $\mathbf{n} \rightarrow -\mathbf{n}$, operación

¹La energía libre que asociamos a las deformaciones es la energía libre de Helmholtz (F), pues estamos considerando sistemas isotérmicos a volumen constante. Esta energía cumple $dF = -SdT + PdV$ [23]

común tanto en nemáticos como en colestéricos, cabe hacer la observación de que esta operación de simetría no es una transformación espacial que transporte materia, tampoco es una inversión central, sino una operación en el parámetro de orden espacial que no afecta las moléculas físicas, la ausencia de inversión central impide que tal operación transforme un colestérico de giro derecho en uno de giro izquierdo. Por otro lado la invarianza bajo rotaciones de π alrededor del director \mathbf{n} , del eje de la hélice que denotamos por χ y del eje transversal $\tau = \chi \times \mathbf{n}$, preservan la orientación local de \mathbf{n} .

Tanto en la fase nemática y colestérica es necesario restringir el desarrollo de la densidad de energía libre a términos cuadráticos pues la restricción de la ecuación (1.4.1), indica que $\nabla \mathbf{n}$ es muy pequeño.

El único invariante escalar lineal es $\nabla \cdot \mathbf{n} = n_{i,i}$, mientras que el único invariante bajo cualquier rotación es $\mathbf{n} \cdot \nabla \times \mathbf{n} = \epsilon_{ijk} n_{k,j} n_i$, donde ϵ_{ijk} es el tensor totalmente antisimétrico de Levi-Civita. Podemos observar que $\nabla \cdot \mathbf{n}$ es impar en \mathbf{n} por lo tanto debe ser excluido del desarrollo de la densidad de energía libre; sin embargo el término $(\nabla \cdot \mathbf{n})^2$ está permitido para nemáticos y colestéricos. El término $\mathbf{n} \cdot \nabla \times \mathbf{n}$ cambia de signo bajo inversión de coordenadas, por lo que sólo aparece en la densidad de energía libre para la fase colestérica, finalmente el invariante escalar $(\nabla \times \mathbf{n})^2$ aparece en ambas fases.

Utilizando la identidad $(\nabla \times \mathbf{n})^2 = (\mathbf{n} \cdot \nabla \times \mathbf{n})^2 + (\mathbf{n} \times \nabla \times \mathbf{n})^2$, donde ambos términos del lado derecho son invariantes simétricos, la densidad de energía libre restringida a derivadas de primer orden, para el caso del nématico se escribe como:

$$(1.4.2) \quad f_{FO} = \frac{1}{2} K_1 (\nabla \cdot \mathbf{n})^2 + \frac{1}{2} K_2 (\mathbf{n} \cdot (\nabla \times \mathbf{n}))^2 + \frac{1}{2} K_3 (\mathbf{n} \times \nabla \times \mathbf{n})^2.$$

A la expresión (1.4.2) se le conoce como densidad de energía de Frank-Oseen donde K_1 , K_2 y K_3 son las constantes elásticas de Frank todas positivas de un orden $\sim 10^{-12} \text{ N}$. Para la fase colestérica en presencia del término $\mathbf{n} \cdot (\nabla \times \mathbf{n})$ nos conduce a la expresión:

$$(1.4.3) \quad f_{FO} = \frac{1}{2} K_1 (\nabla \cdot \mathbf{n})^2 + \frac{1}{2} K_2 (\mathbf{n} \cdot (\nabla \times \mathbf{n}) + q_0)^2 + \frac{1}{2} K_3 (\mathbf{n} \times \nabla \times \mathbf{n})^2,$$

donde $q_0 = \frac{2\pi}{p}$, con p el periodo espacial o paso (pitch) de la fase. Para q_0 positivo en la fase colestérica tomaremos la convención de giro derecho, mientras que para q_0 negativo cuando la fase sea de giro izquierdo.

Las expresiones (1.4.2) y (1.4.3) representan la densidad de energía libre, a veces llamada energía de bulto (bulk), dentro de una frontera específica de los CL, sin embargo para completar la descripción elástica será necesario que consideremos las contribuciones de la energía libre de la frontera, esta frontera comúnmente es una superficie por lo que esta energía libre superficial está dada por:

$$(1.4.4) \quad f_{13} + f_{14} = K_{13} \nabla \cdot (\mathbf{n} \nabla \cdot \mathbf{n}) - K_{24} (\mathbf{n} \nabla \cdot \mathbf{n} + \mathbf{n} \times (\nabla \times \mathbf{n})).$$

La expresión (1.4.4) corresponde a densidades de energía las cuales se deben integrar sobre la superficie cerrada de los CL. La naturaleza matemática de f_{13} y f_{14} permite llevar la expresión $\int(f_{13} + f_{14})dV$ una integral de volumen, a una integral de superficie aplicando el Teorema de Gauss. Dichas integrales junto con $\int f_{FO}dV$ generalmente escalan linealmente con el tamaño del sistema deformado, por lo tanto, la energía libre total estará dada por $\int(f_{FO} + f_{13} + f_{14})dV$, notemos que tanto K_{13} como K_{14} no contribuyen a la energía de bulto, pero bien podrían hacerlo influyendo en el equilibrio de \mathbf{n} mediante las condiciones de frontera en la superficie. Es necesario observar también que cuando el director \mathbf{n} se encuentra en un sistema de coordenadas cartesianas la expresión (1.4.4) se anula, es decir $f_{13} + f_{14} = 0$.

Si consideramos que las expresiones (1.4.2) y (1.4.3) describen por completo el estado de distorsión del sistema, es decir, despreciando los términos que corresponden a la energía de superficie (o divergencia), podemos hacer un análisis de los CL solamente en el bulto, como mostraremos a continuación.

Si empleamos coordenadas cilíndricas (r, φ, z) y suponemos que el director \mathbf{n} tiene las componentes siguientes: $n_x = \cos \varphi$, $n_y = \sin \varphi$ y $n_z = 0$, podemos observar una dependencia bidimensional, desarrollando tenemos que $\nabla \cdot \mathbf{n} = \frac{1}{r}$ mientras que los términos de las constantes K_2 y K_3 se anulan ya que $\nabla \times \mathbf{n} = 0$. Un análisis para el caso tridimensional ocurre cuando tomamos las componentes del director de la siguiente manera: $n_x = \frac{x}{r}$, $n_y = \frac{y}{r}$ y $n_z = \frac{z}{r}$ en donde $r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}$, por lo tanto $\nabla \cdot \mathbf{n} = \frac{2}{r}$ y $\nabla \times \mathbf{n} = 0$. Tanto en el caso bidimensional como en el tridimensional nos referimos a la ecuación (1.4.2), donde el único término para ambos casos que no se anula es la constante K_1 . La constante de Frank K_1 se conoce como *módulo elástico de separación* (splay elastic modulus). La figura (1.4.1.a) muestra la forma geométrica o distorsión que se asocia a la constante K_1 .

Por otro lado considerando las componentes del director como: $n_x = \cos qz$, $n_y = \sin qz$ y $n_z = 0$, con $q = \frac{\alpha}{d} = \frac{2\pi}{p} > 0$ donde α es el ángulo de giro a través de los planos y d la anchura de la muestra que confina la fase mesofásica entre dos superficies definidas. También podemos observar que $\mathbf{n} \cdot (\nabla \times \mathbf{n}) + q = 0$, donde $q = -\mathbf{n} \cdot (\nabla \times \mathbf{n})$ es el número de onda del material asociado al pitch p . El único término no nulo para (1.4.2) y (1.4.3) en este caso es $\mathbf{n} \cdot \nabla \times \mathbf{n}$, término que tiene asociada la constante de Frank K_2 llamado *módulo elástico de giro* (twist elastic modulus). La distorsión asociada a K_2 la podemos observar graficamente en la figura (1.4.1.b).

Por último considerando el director como: $n_x = \sin \varphi$, $n_y = \cos \varphi$ y $n_z = 0$, donde observamos que el único término que no se anula es $\mathbf{n} \times \nabla \times \mathbf{n}$, el cual se le asocia la constante de Frank K_3 conocida como *módulo elástico de flexión* (bend elastic modulus), su interpretación geométrica la observamos en la figura ((1.4.1.c). El significado de este módulo tiene una interpretación geométrica adicional, la expresión $\mathbf{n} \times \nabla \times \mathbf{n}$ es el vector normal a la envolvente del campo director con longitud $|\mathbf{n} \times \nabla \times \mathbf{n}| = \frac{1}{r}$ que es la curvatura.

Los coeficientes K_1 , K_2 , K_3 , K_{13} y K_{24} tienen las dimensiones de fuerza ($[N]$)

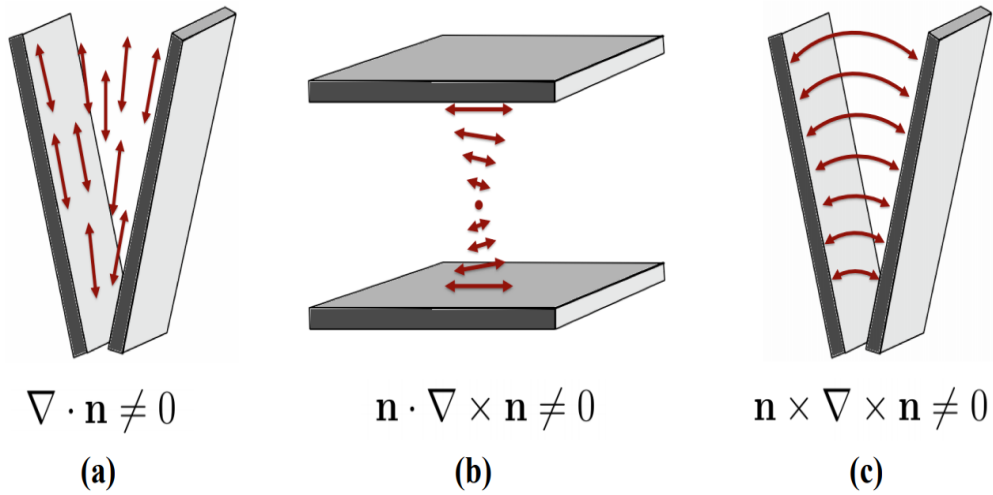


Figura 1.4.1: Módulos elásticos de deformación: (a) Separación, (b) Giro, (c) Flexión [24].

Newtons), sin embargo es necesario aclarar que estas constantes dependen de la sustancia. Por ejemplo, cuando hablamos de un cristal líquido nemático 5CB (4-pentyl-4'-cyanobiphenyl) cerca de $26^\circ C$ los valores de las constantes de Frank son [17]:

$$K_1 = 6.2 \times 10^{-12} N; \quad K_2 = 3.9 \times 10^{-12} N; \quad K_3 = 8.2 \times 10^{-12} N;$$

Por otro lado para una sustancia MBBA (4-methoxybenzylidene-4'-butylaniline), la cual es un cristal líquido nemático, cerca de $25^\circ C$ tiene los valores para las constantes de Frank:

$$K_1 = 6 \times 10^{-12} N; \quad K_2 = 3.8 \times 10^{-12} N; \quad K_3 = 7.5 \times 10^{-12} N;$$

Capítulo 2

Cálculo de Variaciones

2.1. Breve Introducción al Cálculo de Variaciones

El objetivo principal del cálculo de variaciones es encontrar máximos y mínimos de una cantidad escalar F que se escribe como una integral definida (2.1.1), expresión importante en muchas áreas de la física y la matemática [25]; dicha integral representa una trayectoria entre dos puntos fijos en un espacio donde esta bien definida. En realidad existe una infinidad de posibles trayectorias que pasan por esos dos puntos, en principio fijos, aunque no necesariamente como veremos más adelante. El cálculo de variaciones hace uso del *principio variacional de mínima acción* comúnmente usado en la mecánica clásica [26] y hoy en día prácticamente en cualquier rama de la física. Este principio nos dice que de todas las trayectorias posibles aquella en la que F tiene un valor extremal mínimo, es la que describe el sistema mecánico observado en la naturaleza, es decir, las trayectorias que las partículas describen, sujetas a condiciones iniciales. La cantidad F es a menudo llamada la acción, un funcional que a diferencia de una función ordinaria sus variables independientes son funciones, en otras palabras, el funcional es una función de funciones.

En la sección anterior encontramos la expresión de la energía libre, para la fase nemática (1.4.2) y para la fase colestérica (1.4.3), estas expresiones nos indican el estado de deformación de las fases nemática y colestérica respectivamente. Ahora nos interesa conocer el estado de la mesofase cuando ha alcanzado el equilibrio, es decir, cuando su estado de deformación ya es independiente del tiempo, de perturbaciones externas etc. (un tipo de equilibrio termodinámico), dicho estado de equilibrio ocurre justamente cuando la densidad de energía de Frank-Oseen (FO) es mínima.

Podemos recurrir al procedimiento utilizado en la mecánica clásica para obtener ecuaciones de movimiento para n partículas puntuales sujetas a condiciones iniciales, por medio de la variación de un funcional del tipo

$$(2.1.1) \quad F[q_i] = \int_{t_0}^{t_1} f[q_i, \dot{q}_i, t] dt,$$

con $i = 1, 2, 3, \dots, n$, sobre este funcional se realiza una variación denotada por δF de tal manera que se cumpla la condición $\delta F = 0$, es decir, un mínimo (o máximo) o propiamente dicho un extremal de dicho funcional, entonces mediante esta condición obtenemos las ecuaciones de Euler-Lagrange (EL) que dependen de f . La forma de f (conocido como lagrangiano o lagrangiana) depende del sistema mecánico que se desee estudiar, al sustituirse en EL implican las ecuaciones diferenciales que describen tal sistema y las soluciones de estas describen las trayectorias para partículas sujetas a condiciones iniciales. De esta forma el cálculo variacional ofrece un método para encontrar ecuaciones de movimiento que describen los sistemas mecánicos. El cumplimiento de las ecuaciones de Euler-Lagrange son una condición necesaria para el equilibrio en el caso de una teoría continua estática de cristales líquidos. Como hemos mencionado con anterioridad postulamos a los CL como un medio continuo del cual ahora buscamos su estado de equilibrio, mediante el método variacional que nos proporcione ecuaciones, las ecuaciones de equilibrio de mínima distorsión. Por lo tanto es necesario hacer las distinciones de un sistema mecánico de partículas puntuales a un sistema en equilibrio para un medio continuo, como veremos a continuación.

2.2. Condiciones de Frontera Fijas: Anclaje Fuerte

Antes de iniciar es importante conocer cuales son las coordenadas independientes que describen el sistema de equilibrio que deseamos encontrar con el objetivo de ser capaces de realizar una asociación con las coordenadas de un sistema mecánico a un medio continuo, es decir

$$\begin{aligned} q_i(t) &\leftrightarrow \theta(z) \\ \dot{q}_i(t) &\leftrightarrow \theta'(z) \\ t &\leftrightarrow z. \end{aligned}$$

Hemos asociado las coordenadas generalizadas con el ángulo de inclinación θ que caracteriza la deformación, mientras que θ' es un equivalente del tensor de deformación [27], podemos observar la representación de este ángulo en la figura (2.2.1) además hemos asociado el tiempo t con el eje coordenado z . Para llevar a cabo una descripción discreta de partículas a una descripción de un medio continuo primero asociamos la partícula i -ésima tanto su posición q_i como su velocidad \dot{q}_i con $\theta(z)$ y $\theta'(z)$ respectivamente que son funciones continuas que dependen de z ,

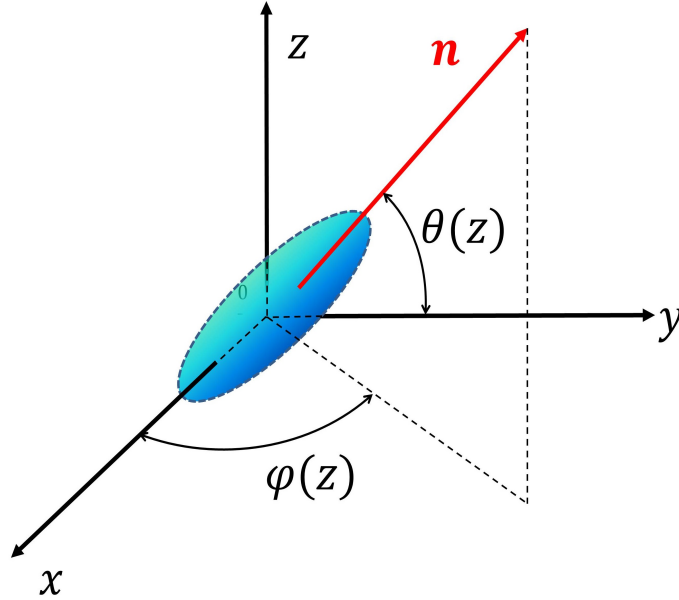


Figura 2.2.1: Representación esquemática del ángulo de inclinación θ dentro del plano de las placas (en el plano $x - y$) y el ángulo de giro ϕ , que representan la inclinación del director \mathbf{n} fuera del plano de las placas.

y segundo, en el caso de un sistema mecánico el lagrangiano f tiene unidades de energía, sin embargo al pasar a una descripción de un medio continuo lo correcto es hablar de una densidad de energía (o densidad lagrangiana) que denotaremos a partir de aquí simplemente como f .

Para resolver un problema mediante el método variacional la manera común de proceder es determinar la función $\theta_{eq}(z) \in [0, d]$, intervalo donde es continua y diferenciable (al menos una vez), que minimiza el funcional

$$(2.2.1) \quad \begin{aligned} F[\theta(z)] &= \int_0^d f[\theta(z), \theta'(z), z] dV \\ F[\theta(z)]/L &= \int_0^d f[\theta(z), \theta'(z), z] dz, \end{aligned}$$

que de manera simplificada la escribimos como

$$(2.2.2) \quad \mathcal{F} = \int_0^d f[\theta, \theta', z] dz,$$

donde \mathcal{F} es la energía total por unidad de área y suponiendo los valores de frontera fijos

$$(2.2.3) \quad \theta(z = 0) = \theta_0, \quad \theta(z = d) = \theta_d,$$

en la muestra del CL donde d es el espesor de la muestra confinada entre placas paralelas como se puede ver en la figura (2.2.3). Cuando los valores de la función desconocida θ_{eq} son fijos en las fronteras de la muestra se conoce como *anclaje fuerte* [27], bajo estas condiciones suponemos que la interacción en la superficie es infinitamente fuerte de manera que la orientación del director está fija en la superficie e independiente de las distorsiones elásticas en el bulto¹

Todas las funciones posibles $\theta(z)$ pueden representarse mediante caminos que conectan los puntos que hacen referencia a las condiciones de frontera, a saber, $z = 0, \theta = \theta_0$ y $z = d, \theta = \theta_d$. Podemos suponer que conocemos la función $\theta_{eq}(z) \in [0, d]$ que minimiza el funcional (2.2.2), la cual satisface las condiciones de frontera (2.2.3), también podemos suponer que una función $\theta(z)$ arbitraria definida también en $[0, d]$ se encuentra cerca de $\theta_{eq}(z)$, y como puede observarse ambas satisfacen las mismas condiciones de frontera como se ve en la figura (2.2.2).

¹En la realidad la interacción molecular en las placas paralelas es de naturaleza finita, sin embargo se considera infinitamente fuerte pues otra manera de escribir la energía elástica total por unidad de área de una muestra de CL es

$$\mathcal{F} = \int_0^d f dz + \gamma_1 + \gamma_2,$$

donde $f = f(\theta, \theta', z)$, y $\gamma_{1,2} = \gamma_{1,2}(\theta(z = 0, d))$ es la densidad de energía superficial, esto corresponde al caso en donde las contribuciones superficiales son muy grandes comparadas con la contribución del bulto[27], es decir,

$$\gamma \gg \int_0^d f dz,$$

de allí que estas contribuciones se consideren infinitamente fuertes matemáticamente.

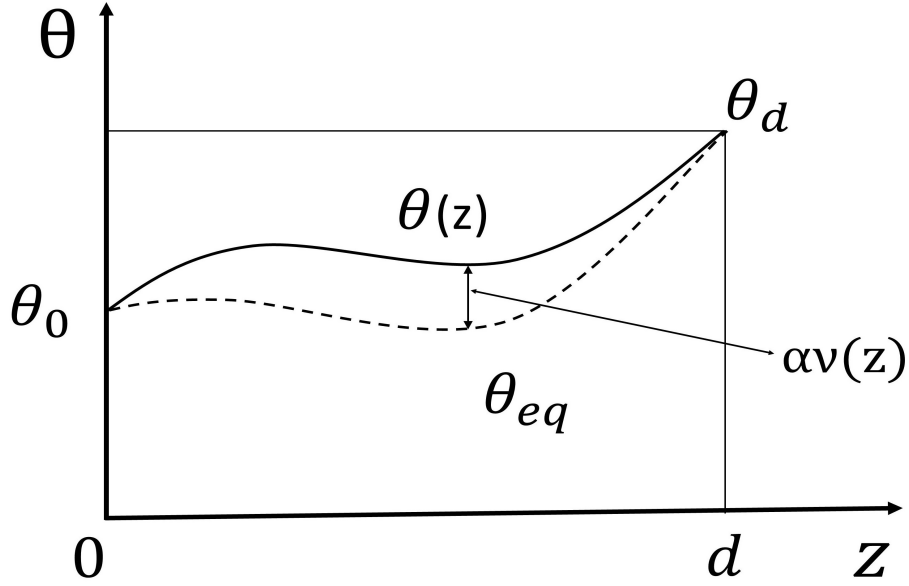


Figura 2.2.2: Condiciones de frontera fijas: Anclaje fuerte.

Cuando decimos que $\theta(z)$ está cerca de $\theta_{eq}(z)$ significa que

$$(2.2.4) \quad \delta\theta(z) = \theta(z) - \theta_{eq}(z),$$

es una cantidad pequeña $|\delta\theta(z)| \ll 1$ para todo $z \in [0, d]$. Por hipótesis la función $\theta_{eq}(z)$ es la función que minimiza el funcional \mathcal{F} y por lo tanto $\mathcal{F}[\theta(z)] < \mathcal{F}[\theta_{eq}(z)]$. Convenientemente escojemos $\theta(z)$ cerca de $\theta_{eq}(z)$ como

$$(2.2.5) \quad \theta(z) = \theta_{eq}(z) + \alpha v(z),$$

donde $v(z) \in [0, d]$ es una función arbitraria diferenciable y α un parámetro pequeño y real. La expresión (2.2.5) nos dice que si $\theta_{eq}(z)$ minimiza a $\mathcal{F}[\theta_{eq}(z)]$ entonces $h(\alpha) = \mathcal{F}[\theta_{eq}(z) + \alpha v(z)]$ tiene un mínimo cuando $\alpha = 0$. Podemos reescribir (2.2.1) de la siguiente forma

$$(2.2.6) \quad \mathcal{F}[\theta_{eq}(z) + \alpha v(z)] = \int_0^d f[\theta_{eq}(z) + \alpha v(z), \theta'_{eq}(z) + \alpha v'(z), z] dz.$$

Sabemos que el principio variacional implica que $\delta F = 0$, por lo tanto

$$(2.2.7) \quad \begin{aligned} \delta\mathcal{F}[\theta_{eq}(z) + \alpha v(z)] &= \left. \frac{d}{d\alpha} \mathcal{F}[\theta_{eq}(z) + \alpha v(z)] \right|_{\alpha=0} = \\ &= \left\{ \frac{d}{d\alpha} \int_0^d f[\theta_{eq}(z) + \alpha v(z), \theta'_{eq}(z) + \alpha v'(z), z] dz \right\}_{\alpha=0} = 0, \end{aligned}$$

observamos que la variación nos conduce al siguiente desarrollo

$$(2.2.8) \quad \delta\mathcal{F} = \left\{ \int_0^d \frac{d}{d\alpha} \left(f[\theta_{eq}(z) + \alpha v(z), \theta'_{eq}(z) + \alpha v'(z), z] \right) dz \right\}_{\alpha=0} = \left\{ \int_0^d \left[\frac{\partial f}{\partial \theta} \frac{\partial \theta}{\partial \alpha} + \frac{\partial f}{\partial \theta'} \frac{\partial \theta'}{\partial \alpha} \right] dz \right\}_{\alpha=0} = 0.$$

De la expresión (2.2.8) y de (2.2.5) observamos que

$$\frac{\partial \theta}{\partial \alpha} = v(z), \quad \frac{\partial \theta'}{\partial \alpha} = v'(z).$$

utilizando el hecho anterior concluimos que

$$(2.2.9) \quad \delta\mathcal{F} = \left\{ \int_0^d \left[\frac{\partial f}{\partial \theta} v(z) + \frac{\partial f}{\partial \theta'} v'(z) \right] dz \right\}_{\alpha=0} = 0.$$

Por otro lado tenemos la siguiente identidad

$$(2.2.10) \quad \frac{\partial f}{\partial \theta'} v'(z) = \frac{d}{dz} \left[\frac{\partial f}{\partial \theta'} v(z) \right] - \left[\frac{d}{dz} \frac{\partial f}{\partial \theta'} \right] v(z),$$

Sustituyendola tano en (2.2.10) como en (2.2.9) y utilizando el teorema fundamental del cálculo adecuadamente, eventualmente llegamos a la siguiente igualdad

$$(2.2.11) \quad \left\{ \int_0^d \left[\frac{\partial f}{\partial \theta} - \frac{d}{dz} \frac{\partial f}{\partial \theta'} \right] v(z) dz + \left[\frac{\partial f}{\partial \theta'} v(z) \right]_0^d \right\}_{\alpha=0} = 0.$$

En el caso de anclaje fuerte los valores de $\theta(z = 0, d)$ estan fijos, ello implica que como por hipótesis θ y θ_{eq} satisfacen las mismas condiciones de frontera se debe cumplir necesariamente que $v(z = 0, d) = 0$. Cuando hacemos $\alpha = 0$ la expresión (2.2.11) se reduce finalmente a

$$(2.2.12) \quad \int_0^d \left[\frac{\partial f}{\partial \theta} - \frac{d}{dz} \frac{\partial f}{\partial \theta'} \right] v(z) dz = 0.$$

En esta expresión el integrando

$$(2.2.13) \quad \frac{\partial f}{\partial \theta} - \frac{d}{dz} \frac{\partial f}{\partial \theta'}$$

debe de ser idénticamente cero, de no serlo podemos suponer que el integrando toma un valor positivo (negativo), por continuidad el integrando deberá der positivo (o negativo) en un intervalo tal que $\Omega \subset D$ con $D = [0, d]$. Por otro lado sí tomamos a la función $v(z)$ cero en casi todas partes de D excepto en Ω entonces el integrando es positivo o negativo

$$\left[\frac{\partial f}{\partial \theta} - \frac{d}{dz} \frac{\partial f}{\partial \theta'} \right] v(z) > 0 ; \left[\frac{\partial f}{\partial \theta} - \frac{d}{dz} \frac{\partial f}{\partial \theta'} \right] v(z) < 0,$$

contradiendo el hecho de que la integral es idénticamente cero, por lo tanto

$$(2.2.14) \quad \frac{\partial f}{\partial \theta} - \frac{d}{dz} \left(\frac{\partial f}{\partial \theta'} \right) = 0.$$

para $0 \leq z \leq d$. La ecuación (2.2.14) se conoce como ecuación diferencial de Euler-Lagrange (EL) para un problema unidimensional de un medio continuo. Las soluciones son una familia de funciones $\theta = \theta(z, c_1, c_2)$ donde c_1 y c_2 son dos constantes de integración determinadas de las dos condiciones (2.2.3).

Cuando f no depende explícitamente de z la primera integral de las ecuaciones de EL (2.2.14) se encuentra de manera inmediatamente que

$$(2.2.15) \quad \theta' \frac{\partial f}{\partial \theta'} - f = C,$$

donde C es una constante.

Para fijar ideas mostraremos un ejemplo sencillo. Consideremos el siguiente director

$$(2.2.16) \quad \mathbf{n} = (\cos \theta(z), \sin \theta(z), 0),$$

y consideremos una muestra de CL nemático confinado entre dos placas paralelas a una distancia d como se muestra en la figura (2.2.3).

Vamos a encontrar la solución de equilibrio utilizando anclaje fuerte en la fronteras de las placas, de esta manera \mathbf{n} deberá satisfacer las condiciones de frontera

$$(2.2.17) \quad \mathbf{n}_0 = (1, 0, 0),$$

en $z = 0, d$, es decir que

$$(2.2.18) \quad \theta|_{z=0,d} = 0$$

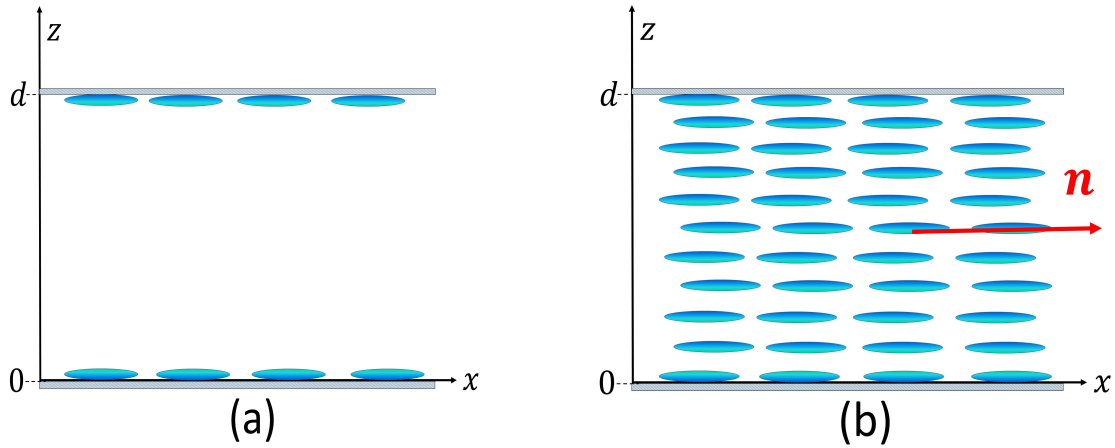


Figura 2.2.3: Cristal líquido nemático confinado entre un par de placas paralelas: (a) Condiciones planares de frontera sobre el par de placas. (b) Textura nemática, alineamiento del director \mathbf{n} uniformemente constante a través de la muestra.

como podemos observar en la figura (2.2.3.a). Insertando el director (2.2.16) en la densidad de Frank-Oseen (1.4.2) obtenemos que

$$(2.2.19) \quad f_{FO} = \frac{1}{2} K_2 \left(\frac{d\theta}{dz} \right)^2,$$

y por lo tanto

$$(2.2.20) \quad \mathcal{F} = \frac{1}{2} K_2 \int_0^d \left(\frac{d\theta}{dz} \right)^2 dz.$$

La ecuación de equilibrio esta dada por la expresión (2.2.14), y utilizando (2.2.19) obtenemos la ecuación diferencial

$$(2.2.21) \quad \frac{d^2\theta}{dz^2} = 0,$$

la cual tiene solución para el ángulo de inclinación

$$(2.2.22) \quad \theta(z) = az + b,$$

con a, b contantes. Aplicando las condiciones de frontera (2.2.18) nos revela que

$$(2.2.23) \quad \theta(z) \equiv 0, \quad 0 \leq z \leq d,$$

y el alineamiento con el directo \mathbf{n} es uniformemente constante a través de la muestra como se ve en la figura (2.2.3.b).

Consideremos ahora que se tiene otra coordenada independiente además del ángulo de inclinación $\theta(z)$, el ángulo de giro (2.2.1) $\phi(z)$ de tal manera el funcional correspondiente ahora se expresa como

$$(2.2.24) \quad f = f(\theta(z), \theta'(z), \phi(z), \phi'(z), z),$$

es decir, ahora el cristal líquido se desarrolla en un espacio tridimensional, por lo tanto el funcional a variar ahora es

$$(2.2.25) \quad \mathcal{F}[\theta(z), \phi(z)] = \int_0^d f[\theta(z), \theta'(z), \phi(z), \phi'(z), z] dz,$$

con condiciones de anclaje fuerte

$$(2.2.26) \quad \theta(z=0) = \bar{\theta}_0, \quad \theta(z=d) = \bar{\theta}_d$$

$$(2.2.27) \quad \phi(z=0) = \bar{\phi}_0, \quad \phi(z=d) = \bar{\phi}_d,$$

El procedimiento es completamente análogo tomando en cuenta que tanto θ y ϕ están cerca de θ_{eq} y ϕ_{eq} respectivamente, es decir que

$$\begin{aligned} \delta\theta(z) &= \theta(z) - \theta_{eq}(z) \\ \delta\phi(z) &= \phi(z) - \phi_{eq}(z), \end{aligned}$$

las cuales son cantidades pequeñas, a saber, $|\delta\theta(z)| \ll 1$ y $|\delta\phi(z)| \ll 1$. Convenientemente escojamos $\theta(z)$ cerca de $\theta_{eq}(z)$ como

$$(2.2.28) \quad \theta(z) = \theta_{eq}(z) + \alpha v(z),$$

y $\phi(z)$ cerca de $\phi_{eq}(z)$ de la siguiente manera

$$(2.2.29) \quad \phi(z) = \phi_{eq}(z) + \beta \omega(z),$$

con $v(z)$ y $\omega(z)$ funciones arbitrarias ambas diferenciables en el intervalo $[0, d]$, α y β son parámetros reales. Las condiciones (2.2.28) y (2.2.29) implican que

$$(2.2.30) \quad v(z=0, d) = \omega(z=0, d) = 0.$$

Ya que las funciones θ_{eq} y ϕ_{eq} minimizan la expresión (2.2.25) se sigue que $\mathcal{F}[\theta, \phi] > \mathcal{F}[\theta_{eq}, \phi_{eq}]$, que en términos de α y β $\mathcal{F}(\alpha, \beta) > \mathcal{F}(0, 0)$, de esta manera la función $g(\alpha, \beta) \equiv \mathcal{F}[\theta_{eq}(z) + \alpha v(z), \phi_{eq}(z) + \beta \omega(z)]$ tiene un mínimo cuando $\alpha = 0$ y $\beta = 0$, de donde se sigue que

$$(2.2.31) \quad \left. \left(\frac{\partial \mathcal{F}}{\partial \alpha} \right) \right|_{0,0} = \left. \left(\frac{\partial \mathcal{F}}{\partial \beta} \right) \right|_{0,0} = 0,$$

para todo $v(z)$ y $\omega(z)$. Por lo tanto

$$\begin{aligned} \delta \mathcal{F} &= \frac{\partial \mathcal{F}}{\partial \beta} = \int_0^d \frac{\partial}{\partial \beta} f = \left\{ \int_0^d \left(\frac{\partial f}{\partial \phi} \frac{\partial \phi}{\partial \beta} + \frac{\partial f}{\partial \phi'} \frac{\partial \phi'}{\partial \beta} \right) dz \right\}_\beta \\ &= \int_0^d \left(\frac{\partial f}{\partial \phi} \omega(z) + \frac{\partial f}{\partial \phi'} \omega'(z) \right) dz = \int_0^d \left[\frac{\partial f}{\partial \phi} - \frac{d}{dz} \frac{\partial f}{\partial \phi'} \right] \omega(z) dz + \left[\frac{\partial f}{\partial \phi'} \omega(z) \right]_0^d \\ &= 0, \end{aligned}$$

donde hemos utilizado la identidad

$$(2.2.32) \quad \frac{\partial f}{\partial \phi'} \omega'(z) = \frac{d}{dz} \left[\frac{\partial f}{\partial \phi'} \omega(z) \right] - \left[\frac{d}{dz} \frac{\partial f}{\partial \phi'} \right] \omega(z).$$

El procedimiento es completamente análogo para $\delta F = \frac{\partial F}{\partial \alpha}$. Imponiendo la condición (2.2.31) y tomando en cuenta que (2.2.30) podemos derivar las funciones que extremizan la ecuación (2.2.25) que son soluciones de las ecuaciones diferenciales

$$(2.2.33) \quad \frac{\partial f}{\partial \phi} - \frac{d}{dz} \left(\frac{\partial f}{\partial \phi'} \right) = 0$$

$$(2.2.34) \quad \frac{\partial f}{\partial \theta} - \frac{d}{dz} \left(\frac{\partial f}{\partial \theta'} \right) = 0,$$

definidas en $0 \leq z \leq d$. Si f no depende explícitamente de z existe una primera integral de la forma

$$(2.2.35) \quad H_0 = \phi' \frac{\partial f}{\partial \phi'} + \theta \frac{\partial f}{\partial \theta'} - f,$$

con H_0 una constante.

2.3. Condiciones de Frontera Variables: Anclaje débil.

En la derivación de las ecuaciones de EL suponemos que las interacciones con las superficies son infinitamente fuertes y mantienen la orientación del director fijo e independiente de las distorsiones elásticas en el bulto. Ahora estamos interesados en reducir la energía, las distorsiones elásticas fuertes en el bulto se pueden relajar desviando al director de los ejes de la superficie $\bar{\theta}_0$ y $\bar{\theta}_d$. Estas desviaciones transportan energía superficial que se describe mediante un potencial de anclaje f_s , el cual es una función de la magnitud de las desviaciones sobre las superficies que confinan la mesofase. La energía total por unidad de área se escribe como:

$$(2.3.1) \quad \mathcal{F} = \int_0^d f[\theta, \theta', z] dz + f_{s0}(\theta_0 - \bar{\theta}_0) + f_{sd}(\theta_d - \bar{\theta}_d),$$

nuevamente la diferencia $\delta\theta = \theta(z) - \theta_{eq}(z) = \alpha\eta(z)$, donde ahora la nueva función $\eta(z)$ no es necesariamente cero en las fronteras (ver figura (2.3.1)), ya que en la variación del funcional obtenemos que

$$(2.3.2) \quad \frac{df_{s0}(\theta_0)}{d\alpha} = \frac{d}{d\alpha} f_{s0}[\theta_{0,eq} + \alpha\eta(z=0)] = \eta(0) \frac{df_{s0}}{d\theta_0},$$

y por lo tanto siguiendo el procedimiento para condiciones fuertes teniendo presente lo anterior obtenemos

$$(2.3.3) \quad \int_0^d \left[\frac{\partial f}{\partial \theta} - \frac{d}{dz} \frac{\partial f}{\partial \theta'} \right] \eta(z) dz + \left[-\frac{\partial f}{\partial \theta'} + \frac{df_{s0}}{dz} \right]_{z=0} + \left[\frac{\partial f}{\partial \theta'} - \frac{df_{sd}}{dz} \right]_{z=d} = 0$$

las ecuaciones de EL se usan para encontrar la familia de soluciones de la forma $\theta = \theta(z, c_1, c_2)$, sin embargo ahora las dos constantes de integración c_1 y c_2 están definidas de las condiciones de frontera Variables de la forma

$$(2.3.4) \quad \left[-\frac{\partial f}{\partial \theta'} + \frac{df_{s0}}{dz} \right]_{z=0} = 0 \quad ; \quad \left[\frac{\partial f}{\partial \theta'} - \frac{df_{sd}}{dz} \right]_{z=d} = 0$$

El procedimiento anterior se puede generalizar si tenemos un director además de variar $\theta(z)$ también está variando con $\phi(z)$, en tal caso se tiene que minimizar el funcional (2.2.24), y siguiendo el procedimiento anterior considerando anclaje débil para las funciones $\theta(z)$ y $\phi(z)$ llegamos al siguiente conjunto de expresiones:

$$(2.3.5) \quad \frac{\partial f}{\partial \theta} - \frac{d}{dz} \left(\frac{\partial f}{\partial \theta'} \right) = 0$$

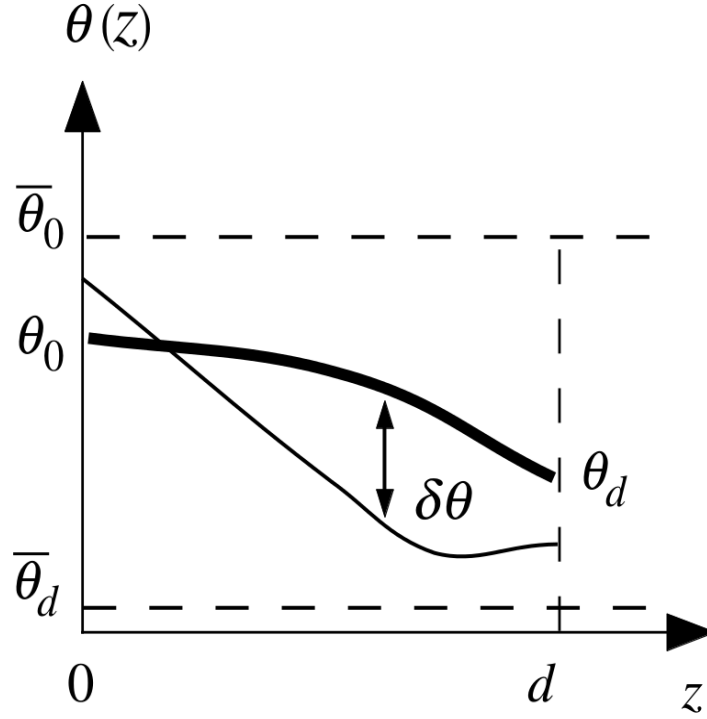


Figura 2.3.1: Condiciones de frontera Variables: Anclaje débil. [17]

$$(2.3.6) \quad \left[-\frac{\partial f}{\partial \theta'} + \frac{df_{s0}}{d\theta} \right]_{z=0} = 0 \quad ; \quad \left[\frac{\partial f}{\partial \theta'} + \frac{df_{sd}}{d\theta} \right]_{z=d} = 0$$

$$(2.3.7) \quad \frac{\partial f}{\partial \phi} - \frac{d}{dz} \left(\frac{\partial f}{\partial \phi'} \right) = 0$$

$$(2.3.8) \quad \left[-\frac{\partial f}{\partial \phi'} + \frac{df_{s0}}{d\phi} \right]_{z=0} = 0 \quad ; \quad \left[\frac{\partial f}{\partial \phi'} + \frac{df_{sd}}{d\phi} \right]_{z=d} = 0.$$

Estas últimas ecuaciones determinan las configuraciones de equilibrio cuando el director \mathbf{n} varía en el espacio y se le permite en las fronteras desviarse, esta desviación ahora también le permite al ángulo de giro ϕ cierto relajamiento el cual tiene una magnitud determinada por el potencial de anclaje f_s expresado en las ecuaciones (2.3.8) para el ángulo de giro y (2.3.6) para el ángulo de inclinación.

Capítulo 3

Energía Libre en Presencia de Campos Externos

3.1. Densidad de Energía en Presencia de Campos Eléctricos y Magnéticos.

Una práctica común en la investigación en cristales líquidos es aplicar campos magnéticos o eléctricos para alinear las muestras de nemático o colestérico [18]. Este alineamiento obliga al director \mathbf{n} a que sea o bien paralelo al campo o bien perpendicular. En la práctica se ha observado que cuando el director es paralelo generalmente corresponde a un cristal líquido nemático mientras que es colestérico cuando el director es perpendicular al campo. Es importante conocer el efecto de los campos sobre las muestras de CL ya que estos modifican su estructura de manera parcial o total, en esta sección se estudiarán los efectos que provocan los campos externos aplicados a una muestra de cristales líquidos.

Los efectos de campos externos aplicados a una muestra de cristal líquido, se estudian cuando éste se encuentra confinado en una celda formada por placas de vidrio, las superficies internas de estas placas están cubiertas por un material conductor, se puede inducir a las moléculas por medio de un recubrimiento para que éstas se adhieran a las superficies de tal manera que queden alineadas a lo largo de una dirección previamente establecida en las placas, esta dirección se conoce como dirección de anclaje, en relación con las condiciones sobre las placas discutidas en el capítulo anterior.

Nuestro objetivo es encontrar la orientación de equilibrio promedio de las moléculas \mathbf{n} en presencia de campo externos, para ello haremos ciertas suposiciones: los CL son un aislante perfecto, las placas de la celda no se polarizan por efecto de acumulación de iones por presencia de impurezas en la mesofase. Para nuestro estudio aplicaremos un campo externo conectando la celda a una fuente que genera un potencial constante a través de la celda. El acoplamiento dieléctrico implica que las moléculas del CL tienden a orientarse de tal manera que la com-

ponente del tensor de polarizabilidad molecular a través del campo es máximo. Para encontrar la orientación de equilibrio del campo director en presencia de un campo eléctrico externo, debemos minimizar, además de la densidad de energía elástica $F = \int f_{FO} dV$, la densidad de energía eléctrica distribuida en un volumen V del espacio [28] expresada como:

$$(3.1.1) \quad F_E = \int f_E dV = \frac{1}{2} \int \mathbf{E} \cdot \mathbf{D} dV$$

una reorientación diferencial promedio de las moléculas puede expresarse como

$$(3.1.2) \quad \delta F_E = \frac{1}{2} \int \mathbf{E} \cdot \delta \mathbf{D} dV.$$

Además cuando \mathbf{n} se reorienta debemos considerar la energía libre asociada con el cambio de las cargas en los electrodos. Para mantener constante el voltaje a través de la celda debe existir una fuente que suministre energía extra δF_G con signo opuesto a δF_E , esta energía extra se manifiesta para mantener el voltaje fijo cuando el desplazamiento eléctrico $\delta \mathbf{D}$ cambia y naturalmente modifica la densidad de carga superficial en las placas por la cantidad $-\delta D_z$, el subíndice z denota la componente de \mathbf{D} a lo largo de la normal a las placas:

$$(3.1.3) \quad \delta F_G = \iint_A \psi \delta D_z dA = \int \text{div}(\psi \delta \mathbf{D}) dV,$$

donde hemos utilizado el teorema de Gauss. En esta expresión ψ denota el potencial eléctrico, mientras que dA es el elemento de superficie de los electrodos. Debido a que $\mathbf{E} = -\nabla \psi$; $\text{div}(\psi \delta \mathbf{D}) = \psi \text{div} \delta \mathbf{D} + \delta \mathbf{D} \cdot \nabla \psi$ y $\text{div} \delta \mathbf{D} = 0$ y puesto que no hay carga libres, eventualmente llegamos a

$$(3.1.4) \quad \delta F_G = - \int \mathbf{E} \cdot \delta \mathbf{D} dV = -2\delta F_E.$$

Por lo tanto la mínima energía total de bulto en el material la podemos obtener sumando las contribuciones de estas variaciones de la siguiente manera

$$(3.1.5) \quad \delta F_{Tot} = \delta F + \delta F_E + \delta F_G = \delta F - \delta F_E = \delta(F - F_E) = 0.$$

La densidad de energía eléctrica (3.1.1) la podemos escribir en términos del campo de fuerza y los componentes del tensor de permitividad dieléctrica $\overleftrightarrow{\epsilon}$. La representación del desplazamiento eléctrico $\mathbf{D}(\mathbf{r})$ esta dada como una funcional lineal del campo eléctrico $\mathbf{E}(\mathbf{r})$ exactamente en el mismo punto \mathbf{r} , sin embargo la

presencia de la rotación intrínseca remanente de la fase isotrópica será despreciada por ser débil, de esta manera

$$(3.1.6) \quad \mathbf{D}(\mathbf{r}) = \overleftrightarrow{\epsilon} \mathbf{E}(\mathbf{r}),$$

el vector desplazamiento depende de la orientación del campo respecto a \mathbf{n} de la siguiente manera:

$$(3.1.7) \quad \begin{aligned} \mathbf{D}(\mathbf{r})_{\parallel} &= \epsilon_{\parallel} \mathbf{E}(\mathbf{r}) \quad , \quad \mathbf{E}(\mathbf{r}) \parallel \mathbf{n} \\ \mathbf{D}(\mathbf{r})_{\perp} &= \epsilon_{\perp} \mathbf{E}(\mathbf{r}) \quad , \quad \mathbf{E}(\mathbf{r}) \perp \mathbf{n} \end{aligned}$$

La expresión (3.1.7) nos brinda información sobre la respuesta del medio anisotrópico en presencia del campo eléctrico, la cual es diferente si el campo se dirige a lo largo del eje del nemático o perpendicular a éste. Tomemos el caso

$$\mathbf{n} \perp \mathbf{E},$$

como consecuencia: la componente perpendicular del vector desplazamiento $D = \epsilon_{\perp} E + \epsilon_a E \cdot n = \epsilon_{\perp} E$, ahora considerando

$$\mathbf{n} \parallel \mathbf{E},$$

por lo tanto $D = \epsilon_{\perp} E + \epsilon_a E \cdot n = (\epsilon_{\perp} + \epsilon_a) E$, pues como vimos $D = \epsilon_{\parallel} E$, por ello $\epsilon_{\parallel} = \epsilon_{\perp} + \epsilon_a$.

Podemos concluir con lo anterior que el tensor dieléctrico tiene la siguiente forma, en términos de una base diádica:

$$(3.1.8) \quad \overleftrightarrow{\epsilon} = \epsilon_{\perp} \mathbb{I} + \epsilon_a \mathbf{nn},$$

de la discusión anterior el vector desplazamiento puede escribirse como

$$(3.1.9) \quad \mathbf{D} = \overleftrightarrow{\epsilon} \mathbf{E} = \epsilon_{\perp} \mathbf{E} + \epsilon_a (\mathbf{E} \cdot \mathbf{n}) \mathbf{n},$$

esta expresión la podemos insertar en (3.1.7) y obtenemos

$$(3.1.10) \quad \mathbf{E} \cdot \mathbf{D} = \epsilon_0 \epsilon_{\perp} |\mathbf{E}|^2 + \epsilon_0 \epsilon_a (\mathbf{n} \cdot \mathbf{E})^2,$$

el término independiente de \mathbf{n} lo podemos despreciar, por lo tanto la densidad de energía libre total finalmente adquiere la forma

$$(3.1.11) \quad f_T = f_{FO} + f_E = f_{FO} - \frac{1}{2} \epsilon_0 \epsilon_a (\mathbf{n} \cdot \mathbf{E})^2$$

El procedimiento anterior puede aplicarse a la energía libre en presencia de un campo magnético de manera completamente análoga si consideramos un campo magnético aplicado \mathbf{B} que provoca una magnetización

$$(3.1.12) \quad \mathbf{M} = \mu^{-1}\chi_{\perp}\mathbf{B} + \mu_0\chi_a(\mathbf{B} \cdot \mathbf{n})\mathbf{n},$$

con la densidad magnética $f_M = -\int_0^B \mathbf{M} \cdot d\mathbf{B}$, bajos argumentos similares discutidos para el campo eléctrico obtenemos

$$(3.1.13) \quad f_T = f_{FO} + f_M = f_{FO} - \frac{1}{2}\mu_0^{-1}\chi_a(\mathbf{n} \cdot \mathbf{B})^2,$$

donde hemos omitido nuevamente el término independiente de \mathbf{n} .

Hasta este punto hemos considerado como se modifica la densidad de energía libre en presencia de campo externos bajo las suposiciones del acoplamiento dieléctrico; sin embargo nuestra descripción aún no es completa. Existe otro fenómenos llamado Flexoelectricidad en los cristales líquidos, este efecto es análogo a la piezoelectricidad en algunos sólidos [22]: La curvatura del director causa la polarización eléctrica del medio donde las moléculas del cristal líquido son anisométricas con momentos dipolares permanentes, ésta geometría no permite la alineación de los mometos dipolares provocando la polarización en el medio. Esta polarización flexoeléctrica tiene una acoplamiento con el campo eléctrico externo que contribuye a la densidad de energía, lineal en \mathbf{E} mediante la expresión

$$(3.1.14) \quad F_{flex} = -\mathbf{P}_f \cdot \mathbf{E},$$

con esta expresión podemos completar la descripción del medio bajo la presencia de campo externos. Mediante una minimización del \mathcal{F} podemos obtener el campo director \mathbf{n} en equilibrio, este estado de mínima energía ocurre además cuando el director \mathbf{n} es uniforme, como vímos en el capítulo anterior.

3.2. Transición de Fredericksz

En una muestra de CL existe una competencia entre el alineamiento del director \mathbf{n} en la frontera de la muestra y la orientación de éste inducido por un campo externo aplicado [18]. En la fase nemática con anisotropía magnética $\chi_a > 0$ un campo magnético \mathbf{H} podría estar en una dirección de tal manera que atrájese al director \mathbf{n} para iniciar un alineamiento en el bulto paralelo a \mathbf{H} , y diferente al alineamiento incial de la muestra, cuando $H = |\mathbf{H}|$ es mayor que algún valor crítico H_c , frecuentemente mayor a cero. Mientras el valor del campo se encuentre en $0 \leq H < H_c$ la alineación del director no se verá influenciada por el campo

magnético, sino hasta que $H \geq H_c$ se iniciará el ajuste de la orientación del director cada vez más paralelo a \mathbf{H} . El cambio en la orientación después de que la magnitud del campo magnético incrementa hasta el valor H_c se conoce como *transición de Fredericksz*,¹ y H_c como el valor del campo crítico. Un fenómeno similar ocurre bajo la influencia de campos eléctricos.

Consideremos una muestra de espesor d en donde confinamos cristal líquido nemático entre dos placas paralelas, éstas previamente han pasado por un proceso de pulimiento para conseguir una dirección particular, en la placa inferior $z = 0$ imponemos la condición de que las moléculas formen un ángulo θ_0 entre \mathbf{n} y el eje x , y en la placa superior $z = d$ forma el ángulo θ_d . Con lo anterior el campo director se puede escribir como $\mathbf{n} = [\cos \theta(z), \sin \theta(z), 0]$, éste campo está parametrizado únicamente por z .

Con el director anterior la densidad de energía puramente elástica de Frank-Oseen es

$$(3.2.1) \quad \mathcal{F} = \frac{1}{2} K_2 \int_0^d \left(\frac{d\theta}{dz} \right)^2 dz,$$

el cual tiene solución al aplicar condiciones de frontera

$$(3.2.2) \quad \theta(z) = (\theta_d - \theta_0) \frac{z}{L} + \theta_0,$$

con $\mathcal{F} = \frac{K_2}{2L} (\theta_d - \theta_0)$.

La ecuación (3.2.1) cuando aplicamos un campo magnético a la muestra, la densidad de energía libre se modifica de la siguiente manera

$$(3.2.3) \quad \mathcal{F} = \frac{1}{2} \int_0^d \left(K_2 \left(\frac{d\theta}{dz} \right)^2 - \chi_a H^2 \sin^2 \theta \right) dz,$$

utilizando la ecuación de (2.2.15) del capítulo anterior obtenemos la expresión

$$(3.2.4) \quad \xi_H^2 \left(\frac{d\theta}{dz} \right)^2 = \cos^2 \theta + C.$$

donde $\xi_H = [K_2/(\chi_a H^2)]^{1/2}$, queremos determinar el campo magnético crítico, para lograrlo vamos a considerar el caso particular cuando los valores en la frontera

¹ También se conoce como *transición de Fredericksz de segundo Orden: La transición de Fredericksz no es una "transición de fase" en el sentido común que damos a estas palabras ya que no hay un cambio de fase ni tampoco fenómenos críticos. Estamos hablando de si esta transición es continua (es decir, la deformación aumenta infinitesimalmente por encima del campo del umbral) o si es discontinua (con un salto, o incluso una histéresis).*

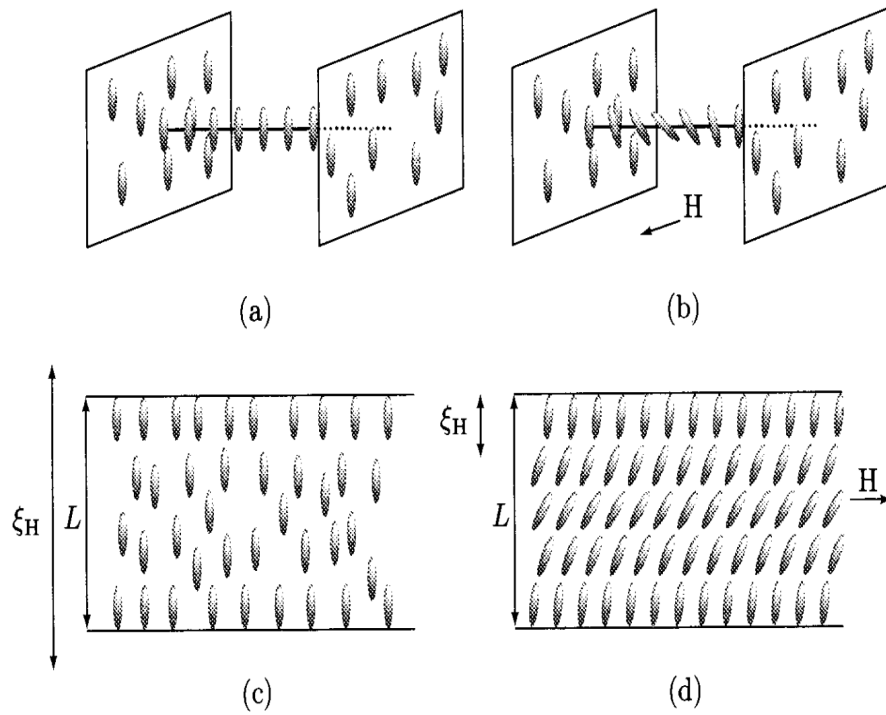


Figura 3.2.1: Transición de Fredericksz debida a un campo magnético \mathbf{H} externo aplicado a una muestra de cristal líquido confinada entre placas paralelas de las moléculas sobre las placas yacen paralelas a la superficie: (a) $H < H_c$. (b) $H > H_c$. Las moléculas permanecen alineadas perpendiculares a la superficie: (c) $H < H_c$. (b) $H > H_c$. [19]

son $\theta_0 = \theta_d = 0$, recordando que estos ángulos se miden respecto al eje x en $z = 0$ y $z = d$ respectivamente. Como hemos mencionado las condiciones de frontera son infinitamente fuertes por lo tanto es natural pensar que el efecto del campo crítico por simetría ocurrirá a una distancia $z = d/2$ de la celda pues es el lugar más alejado de las fronteras donde el efecto de las condiciones de frontera ha disminuido, en este punto se alcanza el máximo por ello $\theta' = 0$, además $\theta(d/2 - z) = \theta(d/2 + z)$. Cuando el director alcanza este ángulo que denotaremos por $\theta(z = d/2) = \theta_c$. Estas condiciones aplicadas directamente a (3.2.4) proporcionan el valor de la constante $C = -\cos^2(\theta_c)$. Sustituyendo esta condición y resolviendo por cuadratura obtenemos

$$(3.2.5) \quad \frac{z}{\xi_H} = \int_0^{\theta(z)} \frac{d\theta}{\sqrt{\cos^2 \theta + \cos^2 \theta_c}}$$

Ya que en θ_c el director sufre una desviación en $z = d/2$, conforme $H \rightarrow H_c$, $\theta_c \rightarrow 0$, es posible hacer un desarrollo en serie de Taylor alrededor de $\theta = 0$ a cuarto orden, así

$$(3.2.6) \quad \frac{d}{2\xi_H} \approx \int_0^{\theta_c} \frac{d\theta}{\sqrt{\theta_c^2 - \theta^2 - (\theta_c^4 - \theta^4)/3}} \approx \int_0^{\theta_c} \frac{d\theta}{\sqrt{\theta_c^2 - \theta^2}} \left[1 + \frac{1}{6}(\theta_c^2 + \theta^2) \right],$$

resolviendo la integral anterior mediante un cambio de variable adecuando llegamos a

$$(3.2.7) \quad \frac{d}{2\xi_H} = \frac{\pi}{2} \left[1 + \frac{1}{4}\theta_c^2 + O(\theta_c^4) \right].$$

Tomando los términos hasta segundo orden en θ_c y evaluando el valor de ξ_H , despejamos θ_c^2

$$(3.2.8) \quad \theta_c^2 = \frac{4d}{\pi} \sqrt{\frac{\chi_a}{K_2}} H - 4$$

La existencia de la deformación ocurre cuando $\theta_c \neq 0 \Rightarrow \theta_c^2 > 0$, despejando además H tenemos

$$(3.2.9) \quad H > \frac{\pi}{d} \sqrt{\frac{K_2}{\chi_a}}$$

Así el campo crítico ocurre cuando

$$(3.2.10) \quad H_c = \frac{\pi}{d} \sqrt{\frac{K_2}{\chi_a}},$$

podemos observar que el campo crítico depende únicamente de las propiedades del material. En la figura (3.2.2) mostramos las diferentes curvas que se presentan cuando el campo externo \mathbf{H} ha superado el campo umbral y por lo tanto se observa una distorsión del ángulo θ a lo largo de la placa. Podemos definir $\bar{H} = H/H_c$ como la intensidad del campo magnético adimensional, de igual manera para $\bar{z} = z/d$. Podemos observar que para $\bar{H} > 1$ los efectos del campo sobre la muestra de CL se pueden visualizar como en (3.2.2), otra observación importante es que a medida que aumentamos la intensidad del campo las curvas tienden al valor $\theta = \pi/2$.

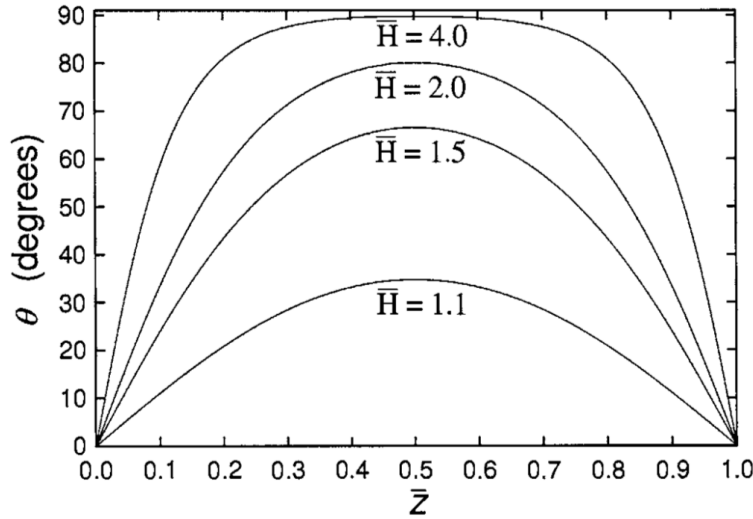


Figura 3.2.2: Curvas solución $\theta(\bar{z})$, $0 \leq \bar{z} \leq 1$ para diferentes valores de la intensidad del campo magnético adimensional \bar{H} [18]

3.2.1. Longitud de Coherencia

En la siguiente expresión

$$(3.2.11) \quad \xi_H = [K_2/(\chi_a H^2)]^{1/2},$$

ξ_H tiene unidades de longitud Figura (3.2.3), de hecho se conoce como longitud de coherencia magnética (coherencia eléctrica ξ_E para el caso eléctrico), ésta mide la distancia en la que el director \mathbf{n} comienza a variar en presencia del campo

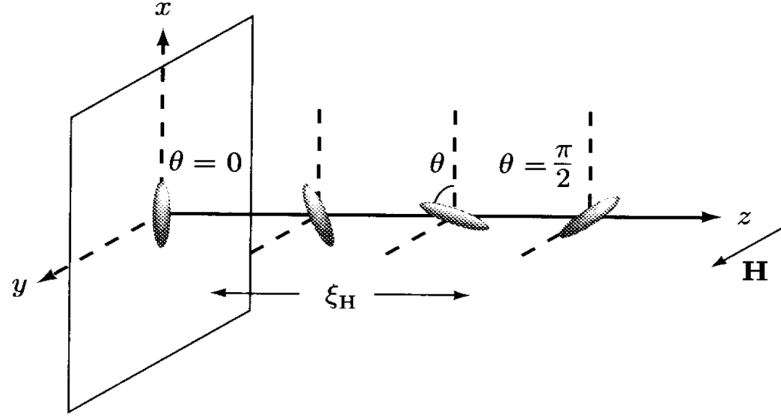


Figura 3.2.3: Longitud de coherencia ξ_H . El efecto del campo \mathbf{H} aplicado a las moléculas modifica la dirección de sus ejes, dentro de la muestra de cristal líquido, hasta alinearse con el campo a una distancia ξ_H de una de las placas de la muestra.[19]

magnético hasta que éste se alinea con el campo. Esta se obtiene por comparar la densidad de energía de Frank-Oseen con la energía de alineamiento[19]

$$(3.2.12) \quad \frac{1}{2}K\xi_H^{-2} = \frac{1}{2}\chi_a H^2 \Rightarrow \xi_H = [K/(\chi_a H^2)]^{1/2},$$

donde hemos hecho la aproximación a una constante $K = K_1 = K_2 = K_3$. Si $\xi_H \gg d$, el campo será incapaz de sobreponerse al efecto producido por las condiciones en las fronteras ya la configuración de equilibrio continuará uniformemente, véase Figura (3.2.1.c). Por otro lado si $\xi_H \ll d$, el director se alineará con el campo \mathbf{H} en el centro de la muestra como se muestra en la Figura (3.2.1.d)

Capítulo 4

Ecuaciones de Equilibrio

En esta sección vamos a encontrar la expresión de la densidad de energía libre de Frank-Oseen para la fase colésterica, es decir, mediante la expresión matemática hallada en el capítulo 1:

$$(4.0.1) \quad f_{FO} = \frac{1}{2}K_1(\nabla \cdot \mathbf{n})^2 + \frac{1}{2}K_2(\mathbf{n} \cdot (\nabla \times \mathbf{n}) + q_0)^2 + \frac{1}{2}K_3(\mathbf{n} \times \nabla \times \mathbf{n})^2.$$

Proponemos las componentes del director \mathbf{n} , también conocido como eje óptico [20], que cumpla la condición $\|\mathbf{n}\|^2 = 1$. Se estudiará a lo largo de este trabajo el director:

$$(4.0.2) \quad \mathbf{n} = [\cos(\theta(z)) \cos(\phi(z)), \sin(\phi(z)) \cos(\theta(z)), \sin(\theta(z))],$$

podemos observar una representación esquemática de los ángulos θ y ϕ en la figura (2.2.1). Por otro lado de las expresiones (4.0.1) y (4.0.2) se obtiene que el valor de la energía libre es

$$(4.0.3) \quad \begin{aligned} f_{FO} = & \frac{1}{2}K_1 \left(\cos^2 \theta(z) \left(\frac{d\theta(z)}{dz} \right)^2 \right) \\ & + \frac{1}{2}K_2 \left(q_0^2 - 2q_0 \cos^2 \theta(z) \frac{d\phi(z)}{dz} + \cos^4 \theta(z) \left(\frac{d\phi(z)}{dz} \right)^2 \right) \\ & + \frac{1}{2}K_3 \left(\sin^2 \theta(z) \left(\left(\frac{d\theta(z)}{dz} \right)^2 + \cos^2 \theta(z) \left(\frac{d\phi(z)}{dz} \right)^2 \right) \right) \end{aligned}$$

La expresión $f_{EM} = -\frac{1}{2}\mathbf{E} \cdot \mathbf{D}$ corresponde a la densidad de energía eléctrica, como vimos detalladamente en el capítulo 3, es decir:

$$\begin{aligned}
 (4.0.4) \quad f_{EM} &= -\frac{1}{2} \mathbf{E} \cdot \mathbf{D} = -\frac{1}{2} (\epsilon_0(\epsilon_{\perp} \mathbf{I} + \epsilon_a \hat{\mathbf{n}} \hat{\mathbf{n}}) \cdot \mathbf{E}) \cdot \mathbf{E} \\
 &= -\frac{1}{2} \epsilon_0 (\epsilon_{\perp} |\mathbf{E}|^2 + \epsilon_a (\hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{E})^2).
 \end{aligned}$$

Consideramos el siguiente campo eléctrico

$$(4.0.5) \quad \mathbf{E} = E_0(0, 0, 1).$$

En su forma general el director se escribe como $\mathbf{n} = (n_x, n_y, n_z)$ por lo tanto se obtiene que el cuadrado del producto escalar con el campo eléctrico resulta $(\mathbf{n} \cdot \mathbf{E})^2 = (E_0 n_z)^2$, de la expresión (4.0.2) se tiene que $n_z = \sin(\theta(z))$, por lo tanto $(\mathbf{n} \cdot \mathbf{E})^2 = E_0^2 \sin^2(\theta(z))$ y $|\mathbf{E}|^2 = E_0^2$, así la expresión final para (4.0.4) en términos de la densidad de energía eléctrica es

$$(4.0.6) \quad f_{EM} = -\frac{1}{2} \epsilon_0 \epsilon_a E_0^2 \sin^2 \theta(z).$$

Con lo discutido anteriormente la expresión final para la densidad de energía libre total adquiere la expresión:

$$\begin{aligned}
 (4.0.7) \quad f_T &= \frac{1}{2} K_1 \cos^2 \theta(z) \left(\frac{d\theta(z)}{dz} \right)^2 + \frac{1}{2} K_2 \left(q_0^2 - 2q_0 \cos^2(\theta(z)) \left(\frac{d\phi(z)}{dz} \right) \right. \\
 &+ \left. \cos^4(\theta(z)) \left(\frac{d\phi(z)}{dz} \right)^2 \right) + \frac{1}{2} K_3 \left(\sin(\theta(z)) \left[\left(\frac{d\theta(z)}{dz} \right)^2 \right. \right. \\
 &+ \left. \left. \cos^2 \theta(z) \left(\frac{d\phi(z)}{dz} \right)^2 \right] - \frac{1}{2} \epsilon_0 \epsilon_a E_0^2 \sin^2 \theta(z) \right).
 \end{aligned}$$

En el capítulo anterior discutimos el fenómeno flexoeléctrico, como observamos la energía total f_T con la que trabajaremos no incluye este término de densidad de energía, la razón es la siguiente: El fenómeno flexoeléctrico ocurre cuando las moléculas son anisométricas a campo eléctricos de alta intensidad, en el modelo que vamos a considerar las moléculas que estamos considerando que forman la fase colestérica son alargadas con enlaces químicos rígidos como se muestra en la figura (1.3.1), por ello en nuestra energía total de bulto hemos omitido esta contribución.

4.1. Ecuaciones de equilibrio para la fase colestérica

La expresión (4.0.7), corresponde a la densidad de energía libre total, vamos a hacer la siguiente identificación para simplificar la notación: $\cos(\theta(z)) = \cos \theta$, $\sin(\theta(z)) = \sin \theta$ y $\frac{d\theta(z)}{dz} = \theta'$, y de manera similar para la variable ϕ . Por lo tanto la expresión se reduce como sigue:

$$(4.1.1) \quad f_T(\theta, \theta', \phi, \phi') = \frac{1}{2}K_1[(\theta')^2 \cos^2 \theta] + \frac{1}{2}K_2[q_0^2 - 2q_0(\phi') \cos^2 \theta + (\phi')^2 \cos^4 \theta] + \frac{1}{2}K_3[(\theta')^2 + (\phi')^2 \cos^2 \theta] \sin^2 \theta - \frac{1}{2}\epsilon_0\epsilon_a E_0^2 \sin^2 \theta.$$

Observamos que la ecuación (4.1.1) no depende de ϕ explícitamente, por lo que la ecuación (2.3.7) se reduce a

$$(4.1.2) \quad \frac{d}{dz} \left(\frac{\partial f_T}{\partial \phi'} \right) = 0.$$

Esto significa que tanto z como ϕ son variables cíclicas, es decir existe una constante de equilibrio. De la ecuación (4.1.2) observamos que $\frac{\partial f_T}{\partial \phi'} = C$ con C una constante. Por otro lado tomando la derivada de f_T con respecto a θ' es

$$(4.1.3) \quad \frac{\partial f_T}{\partial \theta'} = K_2(-q_0 \cos^2 \theta + \phi' \cos^4 \theta) + K_3(\phi' \sin^2 \theta \cos^2 \theta) = C,$$

de donde despejamos ϕ' para obtener:

$$(4.1.4) \quad \phi' = \frac{C + K_2 q_0 \cos^2 \theta}{K_2 \cos^4 \theta + K_3 \sin^2 \theta \cos^2 \theta}.$$

Con las observaciones anteriores se puede construir la expresión (2.2.35) ya que la expresión (4.1.1) no depende explícitamente de la variable z así es posible escribir una expresión como:

$$(4.1.5) \quad H_0 = \theta' \frac{\partial f_T}{\partial \theta'} + \phi' \frac{\partial f_T}{\partial \phi'} - f_T(\theta, \theta', \phi, \phi'; z),$$

H_0 una constante para todo z . Notemos que la ecuación (4.1.5) está en términos de θ , ϕ y sus correspondientes derivadas respecto a z , sin embargo es posible escribirla únicamente en términos de θ y θ' . Para llevar a cabo este procedimiento

insertamos la ecuación (4.1.4) en (4.1.1), y por lo tanto la densidad energía libre total es:

$$\begin{aligned}
 f_T(\theta, \theta') &= \frac{1}{2}K_1[(\theta')^2 \cos^2 \theta] + \frac{1}{2}K_2 \left[q_0^2 - 2q_0 \cos^2 \theta \left(\frac{C + K_2 q_0 \cos^2 \theta}{K_2 \cos^4 \theta + K_3 \sin^2 \theta \cos^2 \theta} \right) \right. \\
 (4.1.6) \quad &+ \left. \cos^4 \theta \left(\frac{C + K_2 q_0 \cos^2 \theta}{K_2 \cos^4 \theta + K_3 \sin^2 \theta \cos^2 \theta} \right)^2 \right] + \frac{1}{2}K_3[(\theta')^2 \sin^2 \theta] \\
 &+ \frac{1}{2}K_3 \sin^2 \theta \cos^2 \theta \left(\frac{C + K_2 q_0 \cos^2 \theta}{K_2 \cos^4 \theta + K_3 \sin^2 \theta \cos^2 \theta} \right)^2 - \frac{1}{2}\epsilon_0 \epsilon_a E_0^2 \sin^2 \theta.
 \end{aligned}$$

Además la derivada parcial $\frac{\partial f_T}{\partial \theta'}$ la podemos deducir de (4.1.6) entonces

$$(4.1.7) \quad \frac{\partial f_T}{\partial \theta'} = \theta'(K_1 \cos^2 \theta + K_3 \sin^2 \theta).$$

Mientras como vimos, existe la constante de movimiento $\frac{\partial f_T}{\partial \phi'} = C$. Con las expresiones (4.1.7) y (4.1.6) desarrollamos para la expresión (4.1.5) lo que da como resultado la expresión:

$$\begin{aligned}
 H_0 &= \theta' \frac{\partial f_T}{\partial \theta'} + \phi' \frac{\partial f_T}{\partial \phi'} - f_T(\theta, \theta', \phi, \phi'; z) \\
 &= (\theta')^2 (K_1 \cos^2 \theta + K_3 \sin^2 \theta) \\
 &\quad + C \left(\frac{C + K_2 q_0 \cos^2 \theta}{\cos^2 \theta (K_2 \cos^2 \theta + K_3 \sin^2 \theta)} \right) \\
 &\quad - \frac{1}{2}K_1[(\theta')^2 \cos^2 \theta] - \frac{1}{2}K_3[(\theta')^2 \sin^2 \theta] \\
 (4.1.8) \quad &+ K_2 q_0 \left(\frac{C + K_2 q_0 \cos^2 \theta}{K_2 \cos^2 \theta + K_3 \sin^2 \theta} \right) \\
 &+ K_3 \cos^2 \theta \left(\frac{C + K_2 q_0 \cos^2 \theta}{K_2 \cos^2 \theta + K_3 \sin^2 \theta} \right)^2 \\
 &- \frac{1}{2}K_3 \sin^2 \theta \left(\frac{C + K_2 q_0 \cos^2 \theta}{K_2 \cos^2 \theta + K_3 \sin^2 \theta} \right)^2 \\
 &+ \frac{1}{2}\epsilon_0 \epsilon_a E_0^2 \sin^2 \theta - \frac{1}{2}K_2 q_0^2
 \end{aligned}$$

Al simplificar convenientemente la ecuación (4.1.8) se reduce a

$$(4.1.9) \quad H_0 = \frac{1}{2}(\theta')^2(K_1 \cos^2 \theta + K_3 \sin^2 \theta) + \frac{1}{2} \frac{(C + K_2 q_0 \cos^2 \theta)^2}{(K_2 \cos^2 \theta + K_3 \sin^2 \theta) \cos^2 \theta} - \frac{1}{2} K_2 q_0^2 + \frac{1}{2} \epsilon_0 \epsilon_a E_0^2 \sin^2 \theta.$$

Para escribir de manera más compacta (4.1.9) definimos las siguientes funciones

$$\begin{aligned} h(\theta) &\equiv (K_1 \cos^2 \theta + K_3 \sin^2 \theta) \\ g(\theta) &\equiv (K_2 \cos^2 \theta + K_3 \sin^2 \theta) \cos^2 \theta, \end{aligned}$$

así reescribimos (4.1.9) como

$$H_0 = \frac{1}{2}(\theta')^2 h(\theta) + \frac{1}{2} \frac{(C + K_2 q_0 \cos^2 \theta)^2}{g(\theta)} - \frac{1}{2} K_2 q_0^2 + \frac{1}{2} \epsilon_0 \epsilon_a E_0^2 \sin^2 \theta,$$

la cual finalmente podemos expresarla como:

$$(4.1.10) \quad h(\theta) \left(\frac{d\theta}{dz} \right)^2 + \frac{(C + K_2 q_0 \cos^2 \theta)^2}{g(\theta)} = -K_2 q_0^2 + \epsilon_0 \epsilon_a E_0^2 \sin^2 \theta = G,$$

con $G \equiv 2H_0$ una constante. Podemos observar que si $q_0 = 0$, por un lado la ec.(4.1.4) resulta

$$(4.1.11) \quad \phi' = \frac{C}{\cos^2 \theta (K_2 \cos^2 \theta + K_3 \sin^2 \theta)} = \frac{C}{g(\theta)},$$

y por otro la expresión (4.1.10) se reduce a

$$(4.1.12) \quad h(\theta) \left(\frac{d\theta}{dz} \right)^2 + \frac{C^2}{g(\theta)} + \epsilon_0 \epsilon_a E_0^2 \sin^2 \theta = G.$$

La expresión (4.1.12) ya has sido tratada en [21] y corresponde a una fase nemática al no tener la quiralidad expresada por q_0 .

A continuación vamos a adimensionalizar los parámetros de la expresión (4.1.10). Adimensionalizar los parámetros proporciona ciertas ventajas, como la independencia de escala para analizar y comparar diferentes configuraciones de equilibrio. Primero realizamos el siguiente cambio de variable $\xi = z/d$ donde ξ

$$(4.1.13) \quad \xi = \begin{cases} 0 & z = 0 \\ 1 & z = d \end{cases}.$$

Este cambio de variable modifica la ecuación (4.1.10) de la siguiente manera:

$$(4.1.14) \quad h(\theta(\xi)) \left(\frac{d\theta}{d\xi} \right)^2 + \frac{(dC + dK_2 q_0 \cos^2 \theta(\xi))^2}{g(\theta(\xi))} - d^2 K_2 q_0^2 + \epsilon_0 \epsilon_a d^2 E_0^2 \sin^2 \theta(\xi) = d^2 G$$

Para llevar a cabo la adimensionalidad de los parámetros de la ecuación multiplicamos por $1/K_1$ la ecuación (4.1.14) y la reescribimos como

$$(4.1.15) \quad h^*(\theta) \left(\frac{d\theta}{d\xi} \right)^2 + \frac{[(dC/K_1) + dq_0(K_2/K_1) \cos^2 \theta(\xi)]^2}{g^*(\theta)} - \frac{K_2}{K_1} d^2 q_0 + \frac{\epsilon_0 \epsilon_a E_0^2 \sin^2 \theta}{K_1/d^2} = \frac{d^2 G}{K_1}.$$

Finalmente definimos los parámetros adimensionales de la siguiente manera

$$\begin{aligned} C_\phi &= (dC/K_1), & \zeta &= \epsilon_0 \epsilon_a E_0^2 / (K_1/d^2), & \eta &= dq_0(K_2/K_1) \\ K &= K_1/K_2 & G^* &= d^2 G/K_1 \end{aligned}$$

Por lo tanto la expresión resultante es:

$$(4.1.16) \quad h^*(\theta) \left(\frac{d\theta}{d\xi} \right)^2 + \frac{(C_\phi + \eta \cos^2 \theta)^2}{g^*(\theta)} - K\eta^2 + \zeta \sin^2 \theta = G^*.$$

De la ec.(4.1.16) se puede resolver por cuadraturas, entonces:

$$(4.1.17) \quad \sqrt{\frac{g^*(\theta)(G^* + K\eta^2 - \zeta \sin^2 \theta) - (C_\phi + \eta \cos^2 \theta)^2}{h^*(\theta)g^*(\theta)}} = \frac{d\theta}{d\xi}$$

$$(4.1.18) \quad \int_{\theta_0}^{\theta_1} \left(\frac{h^*(\theta)g^*(\theta)}{g^*(\theta)(G^* + K\eta^2 - \zeta \sin^2 \theta) - (C_\phi + \eta \cos^2 \theta)^2} \right)^{\frac{1}{2}} d\theta = \int_0^1 d\xi$$

$$(4.1.19) \quad \int_{\theta_0}^{\theta_1} \left(\frac{h^*(\theta)g^*(\theta)}{g^*(\theta)(G^* + K\eta^2 - \zeta \sin^2 \theta) - (C_\phi + \eta \cos^2 \theta)^2} \right)^{\frac{1}{2}} d\theta = 1$$

Análogamente para la expresión (4.1.11) obtenemos

$$(4.1.20) \quad \frac{d\phi}{d\xi} = \frac{C_\phi + \eta \cos^2 \theta}{g^*(\theta)}$$

La expresión (4.1.20) resulta de utilidad pues al tomar las expresiones (4.1.17) y (4.1.20) mediante la operación

$$(4.1.21) \quad \left(\frac{d\theta}{d\xi} / \frac{d\phi}{d\xi} \right) = \frac{d\theta}{d\phi},$$

es posible intragararla por cuadratura, obteniendo la expresión

$$(4.1.22) \quad \sqrt{\frac{g^*(\theta)^2(G^* + K\eta^2 - \zeta \sin \theta) - g(\theta)(C_\phi + \eta \cos^2 \theta)^2}{h^*(\theta)(C_\phi + \eta \cos^2 \theta)^2}} = \frac{d\theta}{d\phi}$$

$$(4.1.23) \quad \int_{\theta_0}^{\theta_1} \left(\frac{h^*(\theta)(C_\phi + \eta \cos^2 \theta)^2}{g^*(\theta)^2(G^* + K\eta^2 - \zeta \sin \theta) - g(\theta)(C_\phi + \eta \cos^2 \theta)^2} \right)^{\frac{1}{2}} d\theta = \int_{\phi_0}^{\phi_1} d\phi$$

$$(4.1.24) \quad \int_{\theta_0}^{\theta_1} \left(\frac{h^*(\theta)(C_\phi + \eta \cos^2 \theta)^2}{g^*(\theta)^2(G^* + K\eta^2 - \zeta \sin \theta) - g(\theta)(C_\phi + \eta \cos^2 \theta)^2} \right)^{\frac{1}{2}} d\theta = \phi_1 - \phi_0.$$

Si los integrandos de las expresiones (4.1.24) y (4.1.19) los redefinimos como

$$(4.1.25) \quad A(\theta) \equiv \left(\frac{h^*(\theta)g^*(\theta)}{g^*(\theta)(G^* + K\eta^2 - \zeta \sin^2 \theta) - (C_\phi + \eta \cos^2 \theta)^2} \right)^{\frac{1}{2}}$$

y

$$(4.1.26) \quad B(\theta) \equiv \left(\frac{h^*(\theta)(C_\phi + \eta \cos^2 \theta)^2}{g^*(\theta)^2(G^* + K\eta^2 - \zeta \sin \theta) - g(\theta)(C_\phi + \eta \cos^2 \theta)^2} \right)^{\frac{1}{2}},$$

las expresiones (4.1.24) y (4.1.19) las podemos escribir ahora simplemente como

$$(4.1.27) \quad \int_{\theta_0}^{\theta_1} A(\theta) d\theta = 1$$

$$(4.1.28) \quad \int_{\theta_0}^{\theta_1} B(\theta) d\theta = \phi_1 - \phi_0$$

Nuestro objetivo principal es, a partir de ahora, encontrar soluciones para las ecuaciones integrales (4.1.27) y (4.1.28), las cuales forman un sistema en definitiva insoluble por la vía completamente analítica.

Las expresiones (2.3.6) y (2.3.8) corresponden a las ecuaciones de frontera variables o anclaje débil, hace uso de la función f_s que corresponde a un potencial de

anclaje como ya se ha mencionado en capítulos anteriores. Cerca de las fronteras de la muestra la orientación de la fase N^* depende también de las propiedades específicas sobre las superficies, donde la situación es más complicada, pues las fuerzas superficiales del director \mathbf{n} son obligadas a orientarse paralela o perpendicularmente a una dirección de tendencia \mathbf{n}_0 , por ello es necesario conocer la forma funcional de la densidad de energía superficial de anclaje en la superficie f_s , la forma más sencilla fue propuesta por primera vez por Rapini y Papoular [18], la cual se puede escribir como

$$(4.1.29) \quad f_s = -\frac{1}{2}w_0 \cos^2 \gamma,$$

donde $\cos \gamma = \mathbf{n} \cdot \mathbf{n}_0$, con γ el ángulo formado entre el director y la dirección de tendencia sobre la superficie y w_0 una constante (frecuentemente renormalizada en términos de las constantes elásticas de Frank), así :

$$(4.1.30) \quad f_s = -\frac{1}{2}w_0(\mathbf{n} \cdot \mathbf{n}_0)^2.$$

Podemos imponer condiciones planares de tal manera que la dirección de tendencia sea paralela a las placas de confinamiento, es decir, $\mathbf{n}_0 = [1, 0, 0]$ (de esta manera $\phi_0 = 0$ para la ecuación (4.1.24)) y \mathbf{n} como en (4.0.2). Por lo tanto la expresión para f_s es la siguiente

$$(4.1.31) \quad f_s = -\frac{1}{2}w_0(\cos \theta \cos \phi)^2.$$

A continuación utilizaremos las condiciones de frontera (2.3.6), a saber:

$$(4.1.32) \quad \left[-\frac{\partial f}{\partial \theta'} + \frac{df_{s0}}{d\theta} \right]_{z=0} = 0$$

$$(4.1.33) \quad \left[\frac{\partial f}{\partial \theta'} + \frac{df_{sd}}{d\theta} \right]_{z=d} = 0,$$

de la ecuación (4.1.32) concluimos que

$$(4.1.34) \quad -\theta'(K_1 \cos^2 \theta + K_3 \sin^2 \theta) + w_o \cos \theta \cos \phi \sin \theta \Big|_{z=0} = 0$$

De manera análoga la ec.(4.1.34) podemos adimensionalizar sus parámetros como

$$(4.1.35) \quad -\frac{1}{d} \frac{d\theta}{d\xi} (K_1 \cos^2 \theta + K_3 \sin^2 \theta) + w_o \cos \theta \cos \phi \sin \theta \Big|_{\xi=0} = 0,$$

$$(4.1.36) \quad \left. \frac{d\theta}{d\xi} \right|_{\xi=0} = \frac{w^* \cos \theta \cos \phi \sin \theta}{h^*(\theta)} \Big|_{\xi=0},$$

donde definimos $w^* \equiv dw_0/K_1$ (observamos que w^* también es adimensional) mientras que para la expresión (4.1.33) se tiene:

$$(4.1.37) \quad \left. \frac{d\theta}{d\xi} \right|_{\xi=1} = -\frac{w^* \cos \theta \cos \phi \sin \theta}{h^*(\theta)} \Big|_{\xi=1}.$$

La expresión (4.1.36) se puede sustituir en (4.1.16), evaluando esta última en $\xi = 0$, obtenemos

$$(4.1.38) \quad \Delta(\theta_0, \phi_0) \equiv \left(\frac{(w^* \cos \theta \cos \phi \sin \theta)^2}{h^*(\theta)} + \frac{(C_\phi + \eta \cos^2 \theta)^2}{g^*(\theta)} - K^* \eta^2 + \zeta \sin^2 \theta \right) \Big|_{\xi=0} = G^*.$$

De manera similar para $\xi = 1$ utilizando (4.1.37) se obtiene

$$(4.1.39) \quad \Delta(\theta_1, \phi_1) \equiv \left(\frac{(w^* \cos \theta \cos \phi \sin \theta)^2}{h^*(\theta)} + \frac{(C_\phi + \eta \cos^2 \theta)^2}{g^*(\theta)} - K^* \eta^2 + \zeta \sin^2 \theta \right) \Big|_{\xi=1} = G^*.$$

Las expresiones (4.1.38) y (4.1.39) nos indican que tanto en $\xi = 0$ como en $\xi = 1$ el valor de éstas es igual a la constante G^* , para que esta igualdad sea posible necesariamente se debe cumplir que

$$(4.1.40) \quad \Delta(\theta_0, \phi_0) = \Delta(\theta_1, \phi_1) = G^*,$$

es decir, que en particular $\theta_0 = \theta_1$ y $\phi_0 = \phi_1$. Bajo esta última observación podemos imponer condiciones sobre el sistema formado por (4.1.27) y (4.1.28) como veremos a continuación. De manera más general podemos pensar que en las fronteras de la muestra se cumple que

$$(4.1.41) \quad \theta_0 = \theta_1 + n\pi,$$

$$(4.1.42) \quad \phi_0 = \phi_1 + m_\phi \pi,$$

con n, m_ϕ enteros, esta última condición permitirá expresar las ecuaciones integrales (4.1.24) y (4.1.19) de una manera conveniente como veremos después. Para verificar que se siga cumpliendo la identidad (4.1.40), primero vamos a desarrollar las siguientes identidades

$$(4.1.43) \quad \begin{aligned} \cos^2 \theta_0 &= (\cos(\theta_1 + n\pi))^2 = (\cos \theta_1 \cos n\pi - \sin \theta_1 \sin n\pi)^2 \\ &= (-1)^{2n} \cos^2 \theta_1 \\ &= \cos^2 \theta_1. \end{aligned}$$

$$(4.1.44) \quad \begin{aligned} \sin^2 \theta_0 &= (\sin(\theta_1 + n\pi))^2 = (\sin \theta_1 \cos n\pi + \cos \theta_1 \sin n\pi)^2 \\ &= (-1)^{2n} \sin^2 \theta_1 \\ &= \sin^2 \theta_1. \end{aligned}$$

Análogamente para la variable ϕ obtenemos ahora

$$(4.1.45) \quad \begin{aligned} \cos^2 \phi_0 &= (-1)^{2m_\phi} \cos^2 \phi_1 = \cos^2 \phi_1 \\ \sin^2 \phi_0 &= (-1)^{2m_\phi} \sin^2 \phi_1 = \sin^2 \phi_1 \end{aligned}$$

De esta manera hemos verificado que la identidad (4.1.40) se mantiene. Por lo tanto las condiciones (4.1.41) y (4.1.42) nos indican que basta un número de vueltas enteras n y m_ϕ para el ángulo de inclinación y de giro respectivamente, que determinan la configuración sobre las fronteras de la muestra de CL. Por ello es posible tomar el valor de las integrales (4.1.27) y (4.1.28) únicamente en un período y sumar las contribuciones necesarias para que ambas ecuaciones se satisfagan mutuamente, imponiendo una condición sobre los n giros enteros de θ , nos permite realizar el siguiente procedimiento. Tomando la expresión (4.1.27):

$$(4.1.46) \quad \begin{aligned} \int_{\theta_0}^{\theta_1} A(\theta) d\theta &= \int_{\theta_0}^{\theta_0+\pi} A(\theta) d\theta + \int_{\theta_0+\pi}^{\theta_0+2\pi} A(\theta) d\theta + \cdots + \int_{\theta_0+(n-1)\pi}^{\theta_0+n\pi} A(\theta) d\theta \\ &= n \int_{\theta_0}^{\theta_0+\pi} A(\theta) d\theta, \end{aligned}$$

es fácil observar que el valor de cada integral del lado derecho de (4.1.46) barre la misma área bajo la curva, de allí que sea equivalente tomar n veces el valor de una de ellas, por lo tanto deberá cumplirse que

$$(4.1.47) \quad n \int_{\theta_0}^{\theta_0+\pi} A(\theta) d\theta - 1 = 0,$$

y de manera análoga para $B(\theta)$ tenemos que

$$(4.1.48) \quad n \int_{\theta_0}^{\theta_0+\pi} B(\theta) d\theta - m_\phi \pi = 0.$$

Las ecuaciones (4.1.47) y (4.1.48) nos dicen que cuantitativamente obtendremos el mismo resultado al integrar $A(\theta)$ (o $B(\theta)$) de θ_0 en $\xi = 0$ hasta θ_1 en $\xi = 1$, que tomar n veces la contribución de la integral de θ_0 a $\theta_0 + \pi$. Más aún es necesario aclarar que la manera en la que estamos tomando los valores n y m_ϕ restringen como se configura la fase colestérica pues esta es una consecuencia de haber utilizado la función f_s que depende de la dirección de tendencia \mathbf{n}_0 como del director \mathbf{n} sobre las fronteras de la muestra. La dirección de \mathbf{n}_0 bien puede yacer sobre el plano XY o ser perpendicular a los planos $Z = const.$, sin embargo las condiciones planares, es decir, cuando \mathbf{n}_0 es paralelo al eje X , han permitido escribir el sistema de ecuaciones (4.1.47) y (4.1.48) lo cual ha brindado un panorama más accesible para resolver el estado de deformación del sistema mesofásico que estamos estudiando, veamos también por ejemplo, la simetría impuesta en el campo eléctrico \mathbf{E} aplicado perpendicular a las placas paralelas como se muestra en la figura (4.1.1). Observemos que si el campo tuviera la dirección $\mathbf{E}_{xy} = E_o(1, 1, 0)$ ya no hay manera de obtener las constantes C_ϕ y H_0 que permitieron determinar el sistema de ecuaciones integrales, sin embargo a pesar de romper la simetría todavía es posible encontrar soluciones de equilibrio procediendo por otro método para resolver un sistema de ecuaciones diferenciales que proporcionan las ecuaciones de EL.

Es posible verificar por otro camino las consecuencias de tomar las condiciones (4.1.41) y (4.1.42) si observamos el espacio fase que define la expresión (4.1.17). Sustituimos (4.1.43) y (4.1.44) y obtenemos que

$$(4.1.49) \quad \begin{aligned} \left. \frac{d\theta}{d\xi} \right|_{\xi=0} &= \sqrt{\frac{g^*(\theta_0)(G^* + K\eta^2 - \zeta \sin^2 \theta_0) - (C_\phi + \eta \cos^2 \theta_0)^2}{h^*(\theta_0)g^*(\theta_0)}} \\ &= \sqrt{\frac{g^*(\theta_1)(G^* + K\eta^2 - \zeta \sin^2 \theta_1) - (C_\phi + \eta \cos^2 \theta_1)^2}{h^*(\theta_1)g^*(\theta_1)}} \\ &= \left. \frac{d\theta}{d\xi} \right|_{\xi=1}. \end{aligned}$$

Por otro lado para (4.1.20) usando (4.1.45)

$$(4.1.50) \quad \left. \frac{d\phi}{d\xi} \right|_{\xi=0} = \frac{C_\phi + \eta \cos^2 \theta_0}{g^*(\theta_0)} = \frac{C_\phi + \eta \cos^2 \theta_1}{g^*(\theta_1)} = \left. \frac{d\phi}{d\xi} \right|_{\xi=1}$$

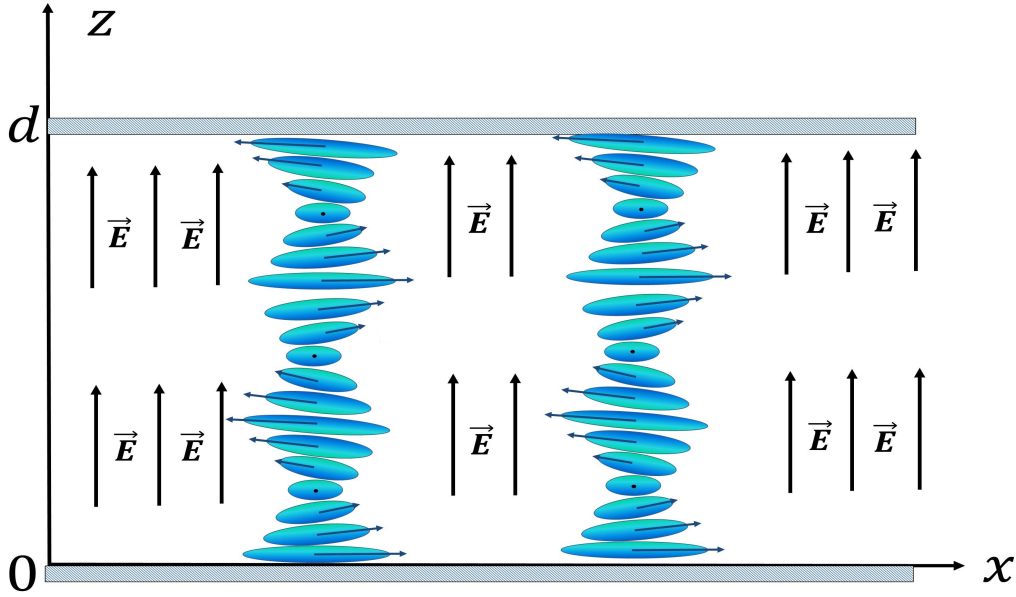


Figura 4.1.1: Representación esquemática de la aplicación de un campo eléctrico $\mathbf{E} = E_0(0, 0, 1)$ a la fase colestérica confinada entre un par de placas paralelas.

el valor de la pendiente es el mismo en ambos puntos de retorno¹ del espacio fase θ' vs θ correspondientes a alguna curva definida allí, véase por ejemplo la figura (4.1.2).

4.1.1. Aproximación a Anclaje fuerte mediante Anclaje débil.

La condición de anclaje fuerte implica que el valor de la derivada θ' es infinito en $\xi = 0, 1$ en el espacio θ vs ξ . Cuando imponemos anclaje débil el valor de la derivada es

$$(4.1.51) \quad \left. \frac{d\theta}{d\xi} \right|_{\xi=0,1} = \pm \frac{w^* \cos \theta \cos \phi \sin \theta}{h^*(\theta)} \Big|_{\xi=0,1},$$

¹El significado de punto de retorno se utiliza ampliamente en mecánica clásica, el cual corresponde a los extremos de las trayectorias que limitan el movimiento de las partículas, en este sentido un punto de retorno ocurre en el espacio fase cuando el momento de la partícula es mínimo y el potencial máximo. En realidad estamos cometiendo un abuso del lenguaje pues recordemos que el estado de equilibrio de la fase colestérica no depende del tiempo, a falta de un término equivalente utilizaremos este término indistintamente a partir de aquí.

es decir, un valor finito el cual induce un relajamiento del director \mathbf{n} sobre la superficie de las placas via \mathbf{n}_0 , este relajamiento tiene un valor específico que se determina encontrando el valor de dicha pendiente, que es proporcional al valor dado w^* , notemos además que el valor de la derivada que nos proporciona la ecuación (4.1.49) es únicamente el valor absoluto ya que en la expresión (4.1.51) al introducir la función f_s nos brinda más información la cual implica que además de ser iguales numéricamente tienen signo contrario, lo que es de suma importancia pues nos indica como es la pendiente en cada placa. Como en anclaje fuerte el valor de esta pendiente tiende a infinito, es decir, $w^* \rightarrow \infty$ o equivalentemente

$$(4.1.52) \quad \frac{1}{w^*} \frac{d\theta}{d\xi} \Big|_{\xi=0,1} \rightarrow 0,$$

se puede esperar que para valores grandes de w^* las condiciones de anclaje débil tiendan al anclaje fuerte. En el espacio fase θ' vs θ , el valor w^* tiene un valor diferente para cada punto sobre la curva y es muy grande cuando $\theta' \rightarrow 0$. Sí el límite existe entonces de (4.1.51):

$$(4.1.53) \quad \pm \cos \theta_{0,1} \cos \phi_{0,1} \sin \theta_{0,1} \sim 0.$$

Las soluciones que satisfacen esta condición son aproximadamente (4.1.41) y (4.1.42). Numéricamente el valor de w^* no es infinito, sin embargo cuanto mas grande sea, esperamos que mejor será la aproximación a anclaje fuerte. Por lo tanto los puntos $\theta_{0,1}$ definirían las condiciones de frontera en las placas paralelas en $\xi = 0, 1$, respectivamente. Observemos que se sigue cumpliendo (4.1.49). Sí bien sabemos como son las condiciones que debe cumplir (4.1.53), aún no sabemos el valor de $\theta_{0,1}$, tampoco como proponerlos, pero podemos identificar estos ángulos. Miremos por ejemplo la figura (4.1.2), los puntos donde se hace cero θ' son el análogo a los puntos de retorno de un sistema mecánico, por ejemplo el de un oscilador armónico simple, y son los que corresponden a los puntos $\theta_{0,1}$.

A continuación explicamos el procedimiento para encontrar estos puntos de retorno de forma analítica. En el espacio fase (θ', θ) veáse figura (4.1.2) notemos que los puntos en las cuales $\theta' = 0$ determinan los puntos de retorno, estos se pueden calcular encontrando los valores en donde θ anula la expresión

$$(4.1.54) \quad g^*(\theta)(G^* + K\eta^2 - \zeta \sin \theta) - (C_\phi + \eta \cos^2 \theta)^2 = 0,$$

por como hemos construido (4.1.19) y (4.1.24).

Mediante un cambio de variable adecuado podemos llevar la ecuación anterior a una ecuación algebraica. Tomámos el siguiente cambio de variable

$$x = \sin^2 \theta ; 1 - x = \cos^2 \theta,$$

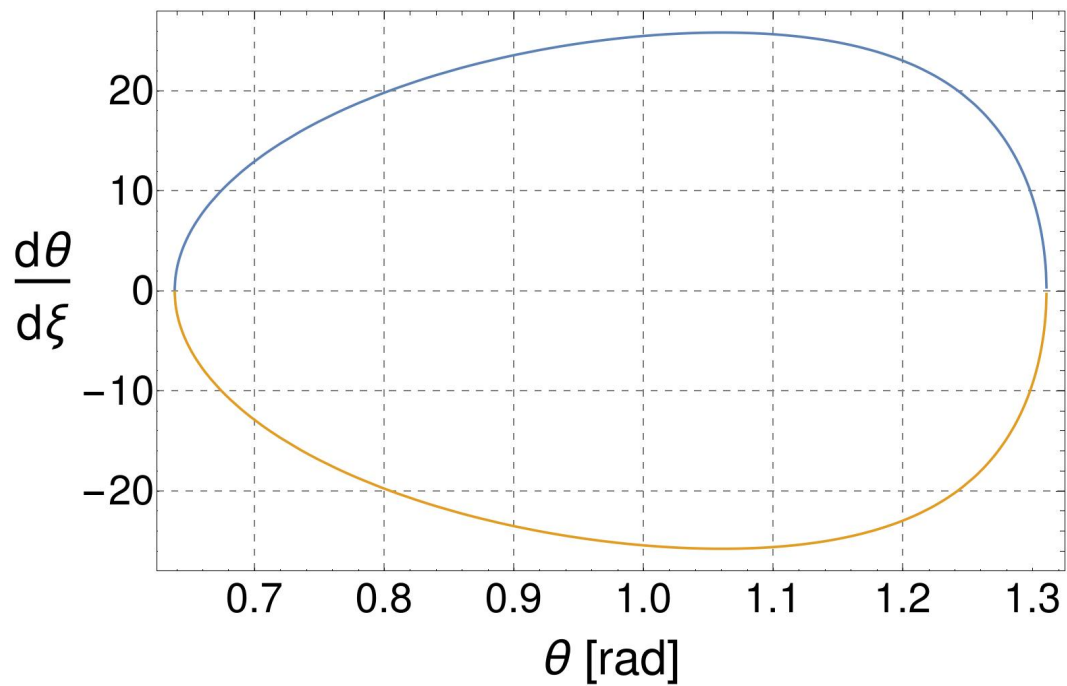


Figura 4.1.2: Espacio fase: Curvas que satisfacen el sistema (4.1.72) con valores para $G^* = 5$, $C_\phi = 12.5204$ y $\zeta = 47.26$, parámetros que determinan los puntos de retorno cuando $d\theta/d\xi = 0$ los cuales se encuentran mediante el método de Cardano para ecuaciones algebraicas con coeficientes reales.

$$(4.1.55) \quad P(x) = g^*(x)(G^* + K\eta^2 - \zeta x) - (C_\phi + \eta(1-x))^2 = 0$$

con $g^*(x) = (K_2/K_1)(1-x)^2 + (K_3/K_1)x(1-x)$, cuando desarrollamos (4.1.55) llegamos a un polinomio $P_3(x)$ de 3er grado, el cual se puede resolver analíticamente mediante el método de Cardano para ecuaciones algebraicas con coeficientes reales, como se ha desarrollado detalladamente en el Apéndice. Notémos que cuando $\zeta = 0$ el polinomio se reduce a segundo grado $P_2(x)$ el cual se resuelve con la fórmula cuadrática. El método de Cardano nos proporciona tres raíces, sin embargo notamos que una de ellas no es físicamente posible pues sus valores conducen a valores de θ complejos, por lo tanto tenemos únicamente dos raíces que corresponden a los dos puntos $\theta_{0,1}$ cuando $\theta' = 0$.

Debido al cambio de variable $x = \sin^2 \theta$ existen en realidad cuatro raíces, es decir:

$$(4.1.56) \quad \theta_0 = \arcsin(\pm\sqrt{x_0})$$

$$(4.1.57) \quad \theta_1 = \arcsin(\pm\sqrt{x_1}),$$

La manera en que elegimos estos puntos de retorno dependerá de la configuración de la fase, pues como observamos en el Apéndice, $x_i = x_i(G^*, C^*, \zeta)$ depende de varios parámetros.

La periodicidad de (4.1.17) y (4.1.22) debe tratarse con cuidado numéricamente. Por ejemplo, si una configuración de la fase colestérica nos proporciona los punto de retorno

$$(4.1.58) \quad \begin{aligned} \theta_{0+} &= \arcsin(+\sqrt{x_0}) \\ \theta_{1+} &= \arcsin(+\sqrt{x_1}) \end{aligned}$$

la curva del espacio fase se encuentra en $\theta > 0$ pues la imagen de la función arco-seno también es positiva cuando su argumento es positivo, procedemos entonces a calcular las integrales (4.1.19) y (4.1.24), la integral la calculamos de θ_0 a θ_1 pero mediante el análisis realizado con anterioridad sabemos que su equivalente es tomar n contribuciones de las integrales de θ_0 a $\theta_0 + \pi$, aquí es donde se presenta el problema ya que estamos sumando contribuciones extras a las integrales. Las dos raíces restantes

$$(4.1.59) \quad \begin{aligned} \theta_{0-} &= \arcsin(-\sqrt{x_0}) \\ \theta_{1-} &= \arcsin(-\sqrt{x_1}) \end{aligned}$$

pertenecen a dos puntos de retorno de la misma configuración que se encuentran dentro del intervalo $\mathcal{J} = [\theta_0, \theta_0 + \pi]$, estos puntos "extras" pertenecen a los puntos de retorno $-\theta_0 + n\pi$ y $-\theta_1 + n\pi$, para el que existe algún valor de n , tal que estos

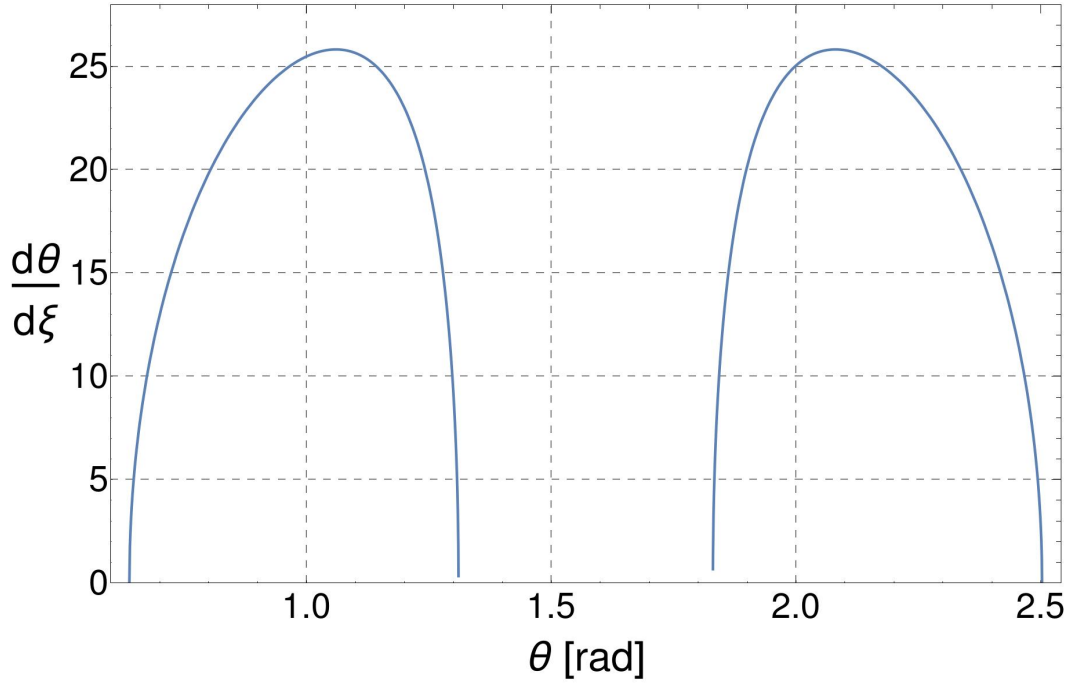


Figura 4.1.3: Región del espacio fase para $\theta' > 0$: Curvas que satisfacen el sistema (4.1.72) con valores para $G^* = 5$, $C_\phi = 12.5204$ y $\zeta = 47.26$, se muestran cuatro puntos de retorno correspondientes a las ecuaciones (4.1.56) y (4.1.57) en el intervalo $0 \leq \theta \leq \pi$.

puntos extras intersectan con \mathcal{J} , gráficamente se visualizan cuatro puntos de retorno en \mathcal{J} que definen dos curvas en el espacio fase, como vemos en la figura (4.1.3), lo cual es correcto por la forma de la función (4.1.17), estas dos curvas se están integrando en el intervalo $(\theta_0, \theta_0 + \pi)$ por lo tanto se suman las dos áreas bajo la curva. La discusión tiene como objetivo mostrar que aunque analíticamente es correcto integrar n veces de θ_0 a $\theta_0 + \pi$ numéricamente debemos evitar de alguna manera sumar la curva definida por los dos puntos extras. La manera de solucionar este problema es integrar nuevamente de θ_0 a θ_1 . Es importante aclarar que esto no es regresar al problema inicial, donde queríamos resolver el sistema formado por (4.1.27) y (4.1.28) como explicaremos detalladamente en seguida. Para fijar ideas utilizaremos el oscilador armónico simple a modo de ilustración.

Cuando se resuelve por cuadraturas el hamiltoniano

$$(4.1.60) \quad H = \frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2 x^2}{2}$$

que define a dicho sistema mecánico llegamos a la expresión

$$(4.1.61) \quad t - t_0 = \pm \int_{x_0}^x \frac{d\bar{x}}{\sqrt{2E - \omega^2 \bar{x}^2}},$$

tomando la masa $m = 1$. Esta integral es bien conocida [25], aquí H es la energía mecánica, la cual es una constante; $H = E$, con E la energía total del sistema pues el hamiltoniano es independiente del tiempo t ; t_0 el tiempo inicial; $x = x(t)$ la posición instantánea y ω la frecuencia angular de oscilación. La integral está definida desde una posición inicial x_0 y x varía hasta una posición final x_f , es decir, es posible definir una función

$$(4.1.62) \quad t(x) = \pm \int_{x_0}^x \frac{d\bar{x}}{\sqrt{2E - \omega^2 \bar{x}^2}} + t_0.$$

La expresión (4.1.62) se puede integrar, es decir, existe una primitiva, de hecho la integral que resulta es una función arco seno o arco coseno que al despejar x de ella obtenemos una función periódica $x = x(t)$, la solución correspondiente a un oscilador armónico simple una función senoidal o cosenoidal, ello dependerá del signo que tomemos.

Para propósitos ilustrativos supongamos que no es posible integrarla de manera analítica por lo tanto no es posible invertir la función, y solo sabremos que $t = t(x)$. La manera de resolver el problema es proceder de manera numérica graficamos $t(x)$ versus x desde x_0 a x_f y posteriormente invertir la función $t = t(x)$ para obtener la solución en términos de la posición $x = x(t)$. Aquí se presenta una dificultad ya que cuando graficamos $t(x)$ vs x , tomando el signo positivo de (4.1.61) e invertimos dicha función obtenemos $x = x(t)$ pero únicamente en el intervalo $[t_0, t_0 + \pi/2]$. Ahora notamos que cuando graficamos (4.1.61) pero con signo negativo y además sumamos la contribución de la primera integral, es decir, el valor de $t(x_f)$ al invertirla obtenemos otra región de la gráfica $x = x(t)$ que ahora corresponde al intervalo $[t_0 + \pi/2, t_0 + \pi]$ únicamente. Este procedimiento consiste entonces en ir construyendo la función $x = x(t)$ a partir de la función (4.1.62) $t = t(x)$ alternando el signo y uniendo los puntos finales de una gráfica con los iniciales de otra, hasta satisfacer las condiciones iniciales, al final habremos recuperado por completo la solución $x = x(t)$. En resumen hemos ido sumando n contribuciones reiterativamente de (4.1.62) hasta reconstruir $x = x(t)$ a partir de $t = t(x)$.

El proceso anterior es innecesario cuando la integral se resuelve con algún cambio de variable y se puede despejar para obtener una expresión y posteriormente imponer las condiciones iniciales (o de frontera según sea el caso). El ejemplo anterior es sumamente útil pues este proceso de construcción de funciones es el que aplicaremos de manera completamente análoga en las expresiones (4.1.19) y (4.1.24) pues no es posible integrarlas analíticamente. En nuestro sistema la función *constructora* es $\xi = \xi(\theta)$ que nos proporciona ((4.1.19), para obtener finalmente $\theta = \theta(\xi)$.

Con la discusión anterior aclaramos que integrar n veces de θ_0 a θ_1 es cuantitativamente correcto, es decir que para efectos numéricos nuestro sistema de ecuaciones por resolver ahora es

$$(4.1.63) \quad n \int_{\theta_0}^{\theta_1} A(\theta) d\theta - 1 = 0$$

$$(4.1.64) \quad n \int_{\theta_0}^{\theta_1} B(\theta) d\theta - m\pi = 0.$$

Otra manera de explicar este procedimiento de integración es el siguiente: Supongamos que estamos en el espacio fase, nos ubicamos en θ_0 con $\theta' = 0$ e iniciamos nuestro recorrido de la curva hasta llegar a θ_1 hasta aquí recorrimos la parte positiva de la curva en el espacio fase $\frac{d\theta}{d\xi} \geq 0$, ahora, ubicados en θ_1 continuamos nuestro recorrido por la parte negativa de la curva $\frac{d\theta}{d\xi} \leq 0$, hasta llegar nuevamente a θ_0 hasta aquí hemos recorrido dos vueltas completas en el espacio fase, repetimos este procedimiento para completar n vueltas hasta que se cumple que el valor de su integral es 1, de manera análoga para las vueltas en ϕ hasta que el valor de su valor es $m\pi$.

En principio podrían existir una infinidad de valores n , m_ϕ enteros que satisfagan el (4.1.63) y (4.1.64), es decir, una solución al sistema que proporcione una configuración de equilibrio o textura; sin embargo antes de encontrar n y m_ϕ , es necesario analizar los parámetros involucrados en el sistema que estamos tratando de resolver pues en realidad nuestro sistema es de la forma

$$(4.1.65) \quad \begin{aligned} n \int_{\theta_0}^{\theta_1} A(\theta, G^*, C_\phi, \zeta) d\theta - 1 &= 0 \\ n \int_{\theta_0}^{\theta_1} B(\theta, G^*, C_\phi, \zeta) d\theta - m\pi &= 0 \end{aligned}$$

con $\theta_0 = \theta_0(G^*, C_\phi, \zeta)$ y $\theta_1 = \theta_1(G^*, C_\phi, \zeta)$, que corresponden a los límites de integración y su valor se determina mediante el método de Cardano. Observemos que los integrandos $A(\theta)$ y $B(\theta)$ al ser radicales no todos sus valores son reales, ello depende de los parámetros, a su vez los límites de integración también dependen de éstos, por lo tanto es necesario tener un panorama general del comportamiento cuantitativo de estos límites cuando variamos los parámetros, pues existen regiones donde tanto los límites de integración como los integrandos toman valores complejos, y nuestro interés, por el sentido físico principalmente es en las curvas reales que proporcionan (4.1.65) es por ello que vamos a determinar las condiciones sobre los límites y los integrandos del sistema.

Ya hemos discutido la elección de los límites de integración, ellos los determinamos cuando $d\theta/d\xi = 0$ en el espacio fase y también los límites de integración que corresponde a la aproximación a anclaje fuerte en las fronteras de las placas paralelas donde se confina la fase colestérica como se muestra esquemáticamente en la figura (4.1.4).

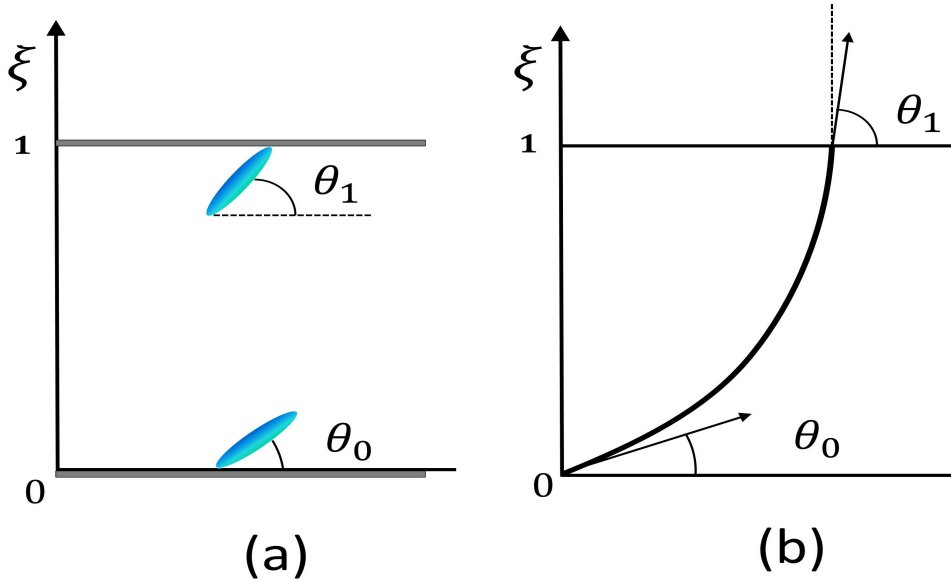


Figura 4.1.4: Condiciones de frontera fijas o Anclaje fuerte: (a) Representación esquématica de las condiciones de frontera en las placas paralelas para θ_0 y θ_1 en $\xi = 0, 1$ respectivamente, (b) Condiciones de frontera fijas con la distorsión del director.

Estamos interesados en ver como los ángulos

$$(4.1.66) \quad \theta_{0,1} = \theta_{0,1}(G^*, C_\phi, \zeta),$$

varían cuando cambiamos los parámetros G^* , C_ϕ y ζ . No es posible, sin embargo, observar todas las variaciones a la vez ya que existen tres variables independientes, así para observar el comportamiento individual de cada parámetro podemos fijar dos de las variables y obtener una gráfica de la forma $\theta_{0,1} = \theta_{0,1}(G^*)$ una vez ya fijados C_ϕ y ζ . Aunque esta simplificación no muestra todo el espectro de las variables nos brinda un panorama general del comportamiento de los ángulos inicial θ_0 y final θ_1 cuando se varían los parámetros del campo ζ por ejemplo. Como se discutió brevemente en el Capítulo 1, las constantes de Frank dependen de la sustancia con la que se este trabajando, y justamente se mantienen constantes cuando la temperatura también lo es, vamos a utilizar las constantes materiales para $5CB^2$. En la figura (4.1.5) podemos notar el comportamiento de los puntos de

²Para el desarrollo siguiente consideraremos las constantes elásticas de Frank son:

$$K_1 = 6.2 \times 10^{-12} N; \quad K_2 = 3.9 \times 10^{-12} N; \quad K_3 = 8.2 \times 10^{-12} N;$$

estas constantes corresponde a la sustancia $5CB$ (4-pentyl-4'-cyanobiphenyl) cerca de $26^\circ C$

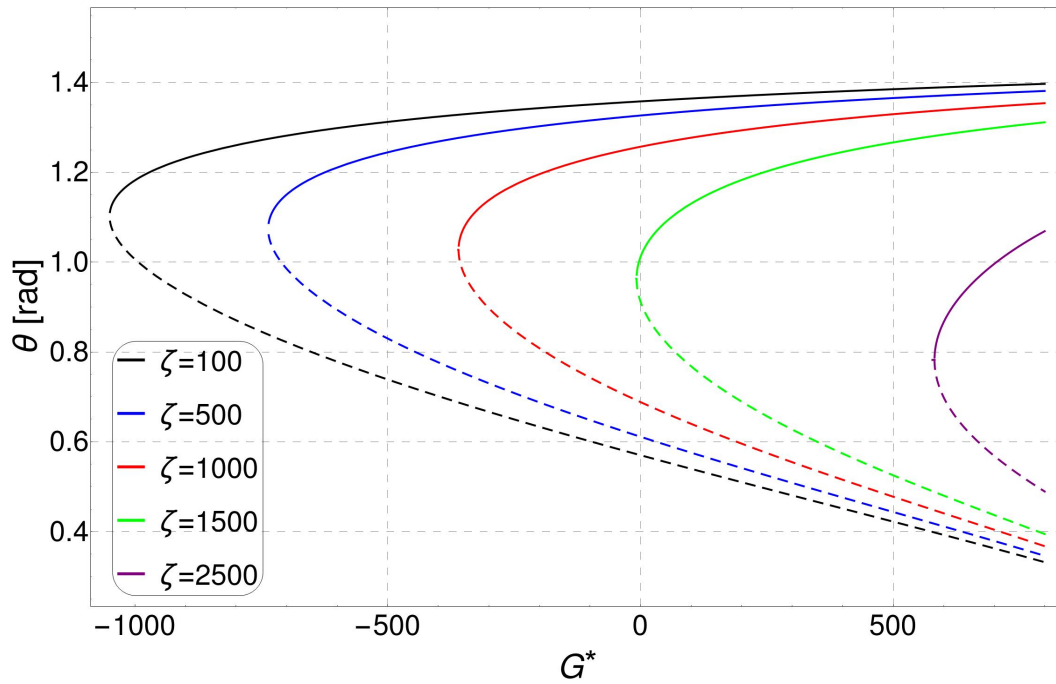


Figura 4.1.5: Soluciones reales x_i ($i = 0, 1$) de $P_3(x)$ por el método de Cardano que corresponden a: θ_0 (curvas punteadas), y θ_1 (curvas continuas) respectivamente, vs el parámetro G^* , con $C_\phi = 10$ para las diferentes curvas. Cada valor de G^* determina dos puntos de retorno del espacio fase θ' vs θ .

retorno en el espacio fase, es decir las soluciones al polinomio de tercer grado, tales soluciones se obtuvieron con el software Mathematica [29]. Las curvas punteadas corresponde a los valores que toma $\theta_0 = \theta_0(G^*)$ cuando variamos el parámetro G^* , mientras que las líneas continuas corresponden a los valores que toma la función $\theta_1 = \theta_1(G^*)$ cuando se fija C_ϕ y un valor de ζ (fijo) para cada color de curva. Por ejemplo si elegimos el valor particular $G^* = 0$, se definen dos ángulos, $\theta_0 = \theta_0(0)$ y $\theta_1 = \theta_1(0)$, más aún estos puntos generan un intervalo $[\theta_0, \theta_1]$, donde la curva del espacio fase que se desarrolla está bien definida y es de valores reales, fuera de él los valores de la curva del espacio fase son complejos, sin embargo las curvas en (4.1.5) tanto para θ_0 y θ_1 no satisfacen el sistema de ecuaciones (4.1.65), es decir, no son una configuración de equilibrio. Otra observación pertinente es que ya fijos los tres parámetros (G^*, C_ϕ, ζ) establecen los dos puntos de retorno que oscilan alrededor de un ángulo específico $\theta_{max}(\xi = \xi_e) = \theta_e$, con ξ_e donde ocurre el máximo valor de θ' sobre la curva definida por los parámetros fijos en el espacio fase (recordemos que el ángulo θ nos brinda información de la manera en la cual se inclina el director \mathbf{n} a lo largo de ξ como se ve en la figura(2.2.1)).

Veamos ahora la figura (4.1.6), podemos notar las variaciones de los ángulos

[18]

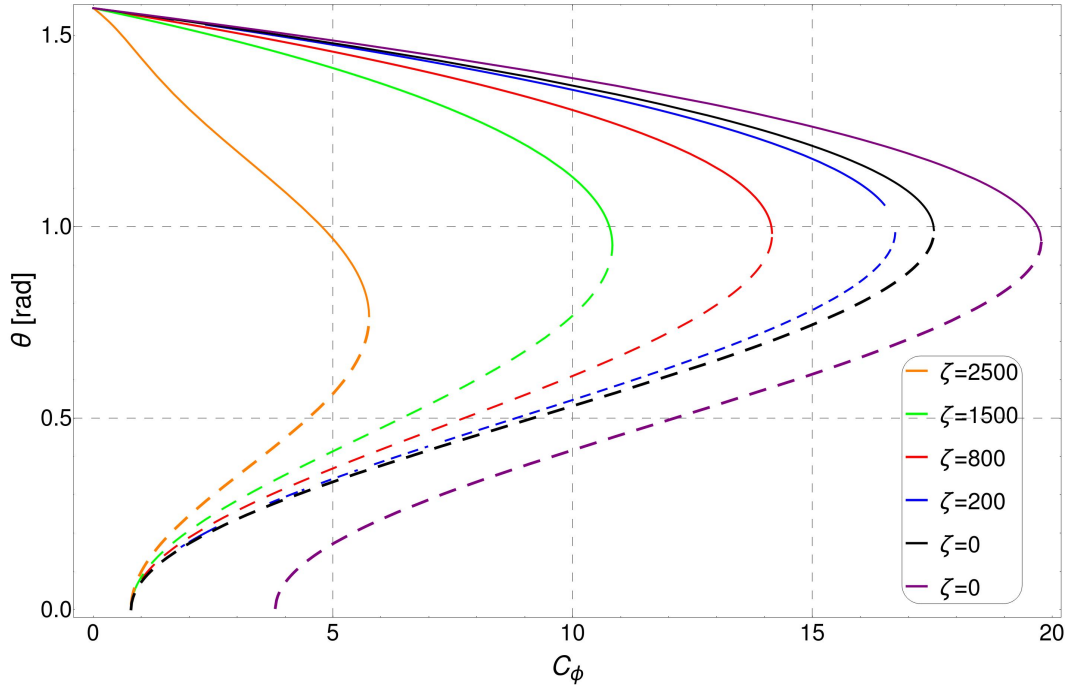


Figura 4.1.6: Soluciones reales x_i ($i = 0, 1$) de $P_3(x)$ por el método de Cardano que corresponden a: θ_0 (curvas punteadas), y θ_1 (curvas continuas) respectivamente, vs el parámetro C_ϕ , con $G^* = 100$ y $\zeta = 2500, 1500, 800$, y 200 (de izquierda a derecha) para las diferentes curvas. Las curvas restantes con $\zeta = 0$ y $G^* = 100$ y 500 (de izquierda a derecha) soluciones de una ecuación cuadrática $P_2(x)$. Cada valor de C_ϕ determina dos puntos de retorno del espacio fase θ' vs θ .

(4.1.66) con respecto a C_ϕ son similares a las curvas de la figura (4.1.5) y el ángulo θ_e al que nos hemos referido donde θ' alcanza un valor máximo se sigue manteniendo en la región $\theta_e > 0$ para las curvas de esta gráfica, sin embargo notemos ahora la figura (4.1.7), en la cual el valor $\zeta = 0$, variable que contiene la información de la intensidad del campo eléctrico, que implica que la fase no está sometida a ningún campo eléctrico, observamos que θ_e ahora oscila en torno a $\theta_e \sim 0$. Sin embargo no podemos, concluir todavía algún resultado, por un lado el valor $\zeta = 0$ no está definido para nuestros propósitos pues en este caso los coeficientes del polinomio $P_3(x_{0,1})$ se indeterminan, y por otro no se satisfacen (4.1.63) y (4.1.64). Retomaremos esta discusión más adelante.

También observamos el comportamiento de los ángulos (4.1.66) cuando variamos el parámetro ζ como se puede observar en la figura (4.1.8), donde nuevamente observamos que el ángulo $\theta_e > 0$.

Para encontrar soluciones al sistema de ecuaciones (4.1.65), en el proceso fue necesario analizar con detenimiento la variable adimensionalizada

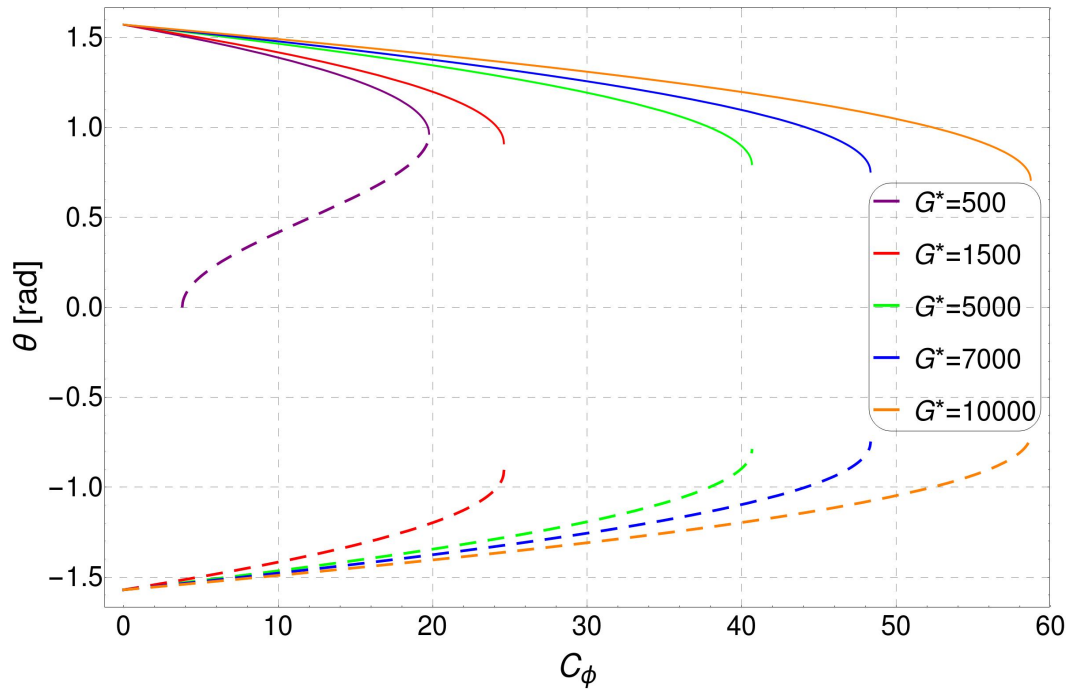


Figura 4.1.7: Soluciones reales x_i ($i = 0, 1$) de $P_2(x)$ que corresponden a: θ_0 (curvas punteadas), y θ_1 (curvas continuas) respectivamente, vs el parámetro C_ϕ , con $G^* = 500, 1500, 5000, 7000$, y 10000 (de izquierda a derecha) para las diferentes curvas, con $\zeta = 0$. Cada valor de C_ϕ determina dos puntos de retorno del espacio fase θ' vs θ .

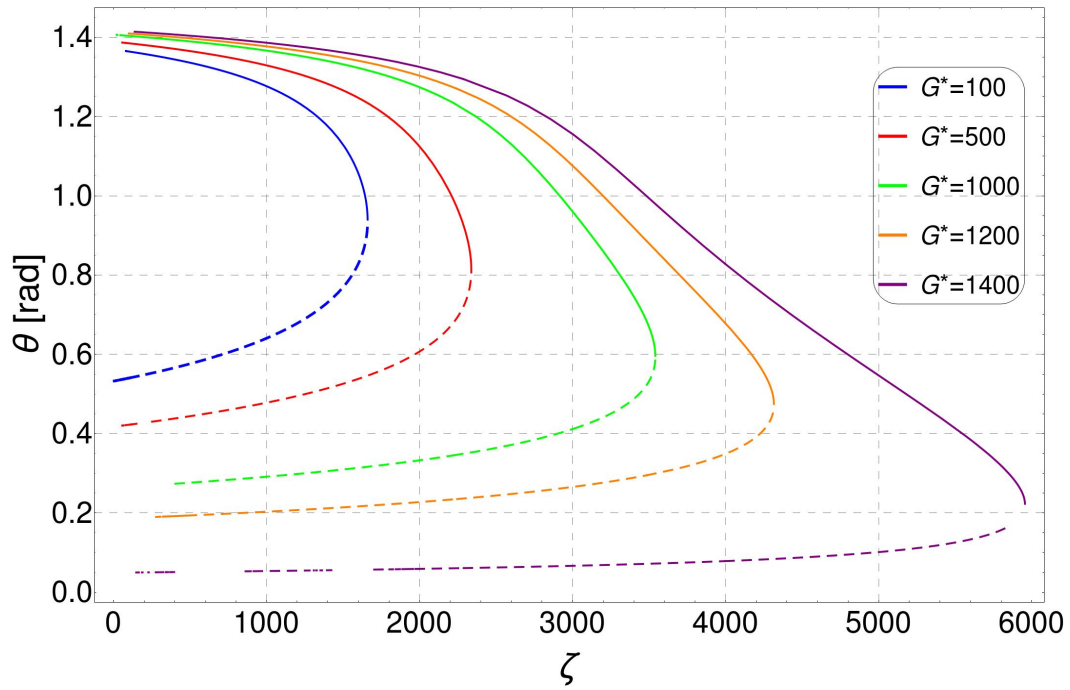


Figura 4.1.8: Soluciones reales x_i ($i = 0, 1$) de $P_3(x)$ por el método de Cardano que corresponden a: θ_0 (curvas punteadas), y θ_1 (curvas continuas) respectivamente, vs el parámetro ζ , con $C_\phi = 10$ y $G^* = 100, 500, 1000, 1200, 1400$ (de izquierda a derecha) para las diferentes curvas. Cada valor de ζ determina dos puntos de retorno del espacio fase θ' vs θ .

$$(4.1.67) \quad \eta = dq_0 K,$$

esta variable contiene la información de la quiralidad de la fase colestérica; si evaluamos $\eta = 0$ obtenemos (4.1.12), la expresión que corresponde a la fase nemática. Vamos a reescribir η por razones que veremos a continuación, recordando que $q_0 = 2\pi/p$, entonces

$$(4.1.68) \quad \eta = 2\pi \left(d/p \right) K$$

la cantidad (d/p) es la razón entre la distancia de separación de las placas paralelas y el pitch de la fase colestérica llamada también radio de confinamiento, intuitivamente podríamos argumentar que esta razón debe ser un entero positivo, más aún ya que esta razón nos brinda la información de cuántos períodos en ϕ hay entre las placas paralelas y ya que hemos caracterizado el número de vueltas en ϕ con m_ϕ un número entero, entonces el parámetro η lo podemos expresar como

$$(4.1.69) \quad \eta = 2\pi m_\phi K$$

Esta afirmación es incorrecta, pues tanto las constantes elásticas de Frank K_i (con $i = 1, 2, 3$) como el valor de q_0 son propiedades intrínsecas del material o sustancia orgánica que en este caso se trata de la fase colestérica, es decir, estas propiedades pertenecen a la densidad de energía de bulto independientemente de las condiciones de frontera sobre las placas paralelas, podemos elegir por ejemplo $d/p = w$, w un número entero, sin embargo este número no satisface las condiciones de frontera necesariamente, ya que no se han considerado las fuerzas elásticas ejercidas por el anclaje fuerte (o débil) ejercidas por las placas sobre la fase por lo tanto concluimos que $m_\phi \neq w$. Al imponer la condición $d/p = w$, lo que estamos haciendo es trabajar con una fase colestérica que antes de ser sometida a condiciones de frontera el paso de la fase colestérica tiene el tamaño $p = d/w$ en el bulto. Observamos que justamente la aplicación de anclaje fuerte (ó débil) sobre las fronteras, que en este caso son placas paralelas, es lo que modifica estos giros en ϕ mediante m_ϕ hasta que la densidad de energía de total Frank–Oseen f_T es mínima, requisito para que la configuración de la fase sea una configuración en equilibrio o textura. Supongamos que existe un entero w tal que $m_\phi = w$, por lo que hemos discutido esto supone que la fase colestérica antes de someterla a fuerzas elásticas en las fronteras ya se encuentra en equilibrio lo cual es poco probable.

El sistema de ecuaciones (4.1.65) puede ser resuelto por el método de Newton-Rapson (NR) [30] para funciones escalares, si definimos las siguiente funciones, con sus dependencias respectivas tenemos:

$$(4.1.70) \quad q(G^*, C_\phi, \zeta, n) = n \int_{\theta_0(G^*, C_\phi, \zeta)}^{\theta_1(G^*, C_\phi, \zeta)} A(\theta, G^*, C_\phi, \zeta) d\theta - 1$$

$$(4.1.71) \quad s(G^*, C_\phi, \zeta, n, m_\phi) = n \int_{\theta_0(G^*, C_\phi, \zeta)}^{\theta_1(G^*, C_\phi, \zeta)} B(\theta, G^*, C_\phi, \zeta) d\theta - m_\phi \pi$$

Por lo tanto lo que buscamos es cuando se cumple

$$(4.1.72) \quad \begin{aligned} q(G^*, C_\phi, \zeta, n) &= 0 \\ s(G^*, C_\phi, \zeta, n, m_\phi) &= 0, \end{aligned}$$

simultáneamente. Notemos que no es posible resolver este sistema ya que tenemos 2 ecuaciones y 5 variables, es necesario entonces fijar 3 variables para que este sistema sea soluble. La manera en que procedimos fue la siguiente: Primero es necesario asegurarse que las variables que se van a fijar correspondan a valores reales de las soluciones del polinomio $P_3(x_{0,1})$ para verificar que los límites de integración efectivamente son reales, lo que impone la condición $|\sqrt{x_{0,1}}| \leq 1$ sobre los valores de las raíces, que a su vez implica que $|\theta_{0,1}| \leq \pi/2$, con $\theta_{0,1} = \arcsin(\pm\sqrt{x_{0,1}})$. A pesar de que tenemos expresiones analíticas para las raíces proporcionadas por el método de Cardano, los cálculos numéricos de estas expresiones arrojan números complejos, es decir, $\arcsin(\pm\sqrt{x_i}) = a + jb$ (con $j = \sqrt{-1}$ y a, b número reales), sin embargo se puede prescindir de la parte compleja si $|b| \ll 1$. Segundo, los límites de integración son los valores en los cuales el integrando diverge, por ello podría pensarse que la integral en algún momento del cálculo numérico no converge ya que justo en esos puntos (de retorno) el error numérico podría crecer y arrojar resultados erróneos.

Recurramos nuevamente al ejemplo del oscilador armónico para ilustrar esta dificultad de una manera sencilla, específicamente nos referimos a la expresión (4.1.61), los puntos de retorno se encuentran en $x = \pm\sqrt{2E/\omega^2}$, en estos puntos el integrando diverge. Supongamos que el integrando, que definiremos como $I(x) \equiv 1/\sqrt{2E - \omega^2 x^2}$ lo desarrollamos en serie de Taylor en $x = 0$ y obtenemos $I(x) = C_0 + C_2 x^2 + O(x^4)$, con C_0 y C_2 constantes, que al integrarla y llevar a cabo la sustitución en los puntos de retorno no diverge. Lo mismo ocurre en los integrando del sistema (4.1.65), por supuesto que este análisis es para el integrando $I(x)$ que es analítico, es decir, que puede expresarse como una serie de potencias convergente; para nuestro sistema (4.1.65) los integrandos son del tipo elíptico que también admiten expansión en serie y a pesar de que no exista una primitiva para resolver estas integrales se sigue aplicando el mismo razonamiento a (4.1.61).

Finalmente, el método numérico aplicado para el cálculo de las integrales tiene la capacidad para manejar integrandos que "explotan", este método de integración comprueba automáticamente las singularidades en los puntos de la región de integración [29]. Por último, visualizar gráficamente las funciones (4.1.71) y (4.1.70)

es de suma utilidad pues nos permite observar los lugares donde estas funciones se intersectan y mediante un ajuste de los parámetros G^* , C_ϕ , ζ , n y m_ϕ nos aproximamos para que se satisfaga (4.1.72) una vez que nos hemos acercado lo suficiente, es decir, una vez que las funciones se intersectan en cero, mediante el método de NR encontramos la solución buscada con una mejor aproximación.

En suma hemos establecido las condiciones para los límites de integración; discutimos los posibles errores numéricos debidos a las singularidades de los integrandos y a la integración numérica y establecimos una forma visual para facilitar las soluciones de (4.1.72), mediante un método numérico para afinar nuestra aproximación.

4.2. Determinación del Campo Eléctrico Umbral

ζ_0

Para finalizar este capítulo encontraremos el campo umbral ζ_0 aproximado para la fase colestérica, en el capítulo 3 encontramos un campo magnético adimensional \bar{H} para la fase nemática, que es el campo magnético mínimo necesario para que se presente una distorsión sobre la fase nemática debida a la presencia de un campo externo, utilizando un procedimiento similar encontraremos un campo eléctrico umbral adimensional para la expresión

$$(4.2.1) \quad h^*(\theta) \left(\frac{d\theta}{d\xi} \right)^2 + \frac{(C_\phi + \eta \cos^2 \theta)^2}{g^*(\theta)} + \zeta \sin^2 \theta = \Omega,$$

donde $\Omega \equiv G^* + K\eta^2$ una constante. La constante Ω de la ecuación diferencial (4.2.1) la determinamos teniendo que el efecto del campo eléctrico ζ implica que $d\theta/d\xi = 0$ cuando $\theta(\xi = 1/2) = \theta_c$ por lo tanto

$$(4.2.2) \quad \Omega = \frac{(C_\phi + \eta \cos^2 \theta_c)^2}{g^*(\theta_c)} + \zeta \sin^2 \theta_c,$$

así la ecuación diferencial (4.2.1) se puede reescribir convenientemente definiendo Φ como

$$(4.2.3) \quad \Phi(\lambda) \equiv \left(\frac{(C_\phi + \eta \cos^2(\lambda\theta_c))^2}{g^*(\lambda\theta_c)} - \frac{(C_\phi + \eta \cos^2(\lambda\theta))^2}{g^*(\lambda\theta)} - \zeta(\sin^2(\lambda\theta) - \sin^2(\lambda\theta_c)) \right) / h^*(\lambda\theta),$$

entonces es posible escribir (4.2.1) como

$$(4.2.4) \quad \Gamma(\lambda) \equiv \Phi(\lambda) - \left(\frac{d\theta}{d\xi} \right)^2 = 0,$$

La forma en la hemos definido $\Gamma(\lambda)$, es la siguiente: sobre esta función llevaremos a cabo un desarrollo en serie de Taylor alrededor de cero para la variable λ para tener solo una variable, por lo tanto el desarrollo en serie es

$$(4.2.5) \quad \Gamma(\lambda) = -\left(\frac{d\theta}{d\xi}\right)^2 + s_2\lambda^2 + s_4\lambda^4 + O(\lambda^5),$$

donde los coeficientes $s_{1,2} = s_{1,2}(\theta, \theta_c, G^*, C_\phi, \zeta, \eta)$. Podemos tomar esta expresión únicamente hasta cuarto orden pues conforme $\zeta \rightarrow \zeta_0$, $\theta_c \rightarrow 0$. Por otro lado realizamos el cambio de variable $\theta = \theta_c \sin u$, donde $u = u(\xi)$, de esta manera

$$(4.2.6) \quad \left(\frac{d\theta}{d\xi}\right)^2 = (\theta_c \cos u)^2 (u')^2,$$

realizando este cambio de variable obtenemos la expresión

$$(4.2.7) \quad \Gamma(\lambda) \approx \frac{1}{3}\theta_c^2 \cos^2 u \left(j_2\lambda^2 + j_4\lambda^4 \sin^2 u - 3\left(\frac{du}{d\xi}\right)^2 \right) = 0,$$

la cual tiene solución una solución trivial $\frac{1}{3}\theta_c^2 \cos^2 u = 0$, observemos además que $s_{1,2} \neq j_{1,2}$. Conviene entonces tomar la solución no trivial, es decir:

$$(4.2.8) \quad j_2\lambda^2 + j_4\lambda^4 \sin^2 u - 3\frac{du}{d\xi} \approx 0.$$

La ecuación diferencial (4.2.8) se puede resolver por cuadraturas escribiéndola como

$$(4.2.9) \quad \int_0^{1/2} d\xi = \int_0^{\pi/2} \frac{du}{\sqrt{\frac{1}{3}(j_2\lambda^2 + j_4\lambda^4 \sin^2 u)}}.$$

Nuevamente vamos a realizar un desarrollo en series de Taylor pues como indicamos al inicio de esta sección, estamos realizando el procedimiento similar al desarrollado para encontrar el campo umbral \bar{H} . Para llevar a cabo esta expansión definimos la siguiente función

$$(4.2.10) \quad \Lambda(\theta_c) \equiv \frac{1}{\sqrt{\frac{1}{3}(j_2\lambda^2 + j_4\lambda^4 \sin^2 u)}}$$

donde llevaremos a cabo el desarrollo en términos de θ_c haciendo $\lambda = 1$, recordemos que los coeficientes $j_{1,2} = j_{1,2}(\theta_c, G^*, C_\phi, \zeta, \eta)$, de esta manera tenemos del desarrollo

$$(4.2.11) \quad \Lambda(\theta_c) \approx p_1 + (p_2 + d_2 \sin^2 u)\theta_c^2 + O(\theta_c^3),$$

con $p_{1,2} = p_{1,2}(\zeta, \eta, C_\phi)$ y $d_2 = d_2(\zeta, \eta, C_\phi)$ por lo tanto si tomamos hasta segundo orden el lado derecho de (4.2.9) se puede reescribir como

$$(4.2.12) \quad \frac{1}{2} \approx \int_0^{\pi^2} (p_1 + (p_2 + d_2 \sin^2 u)\theta_c^2) du,$$

Cuando integramos el lado derecho de la expresión (4.2.12) obtenemos

$$(4.2.13) \quad -\frac{1}{2} + \Pi(\theta_c, \zeta, \eta, C_\phi) \approx 0.$$

De esta última expresión es posible despejar la variable θ_c y obtenemos una función de la forma

$$(4.2.14) \quad \theta_c \approx \pm \psi(\zeta, \eta, C_\phi),$$

tomamos el signo positivo y además por la condición sobre $\theta_c \rightarrow 0$, entonces $\psi(\zeta_0, \eta, C_\phi) \approx 0$. Finalmente, de ψ es posible despejar la variable ζ_0 como

$$(4.2.15) \quad \zeta_0 \approx \frac{C_\phi^2(k_3 - 2k_2) + C_\phi(k_3 - 2k_2\eta) + k_3\eta^2 + k_2^2\pi^2}{k_2^2}.$$

También podemos encontrar el valor de la constante C_ϕ , la cual como sabemos en una constante de integración que debe ser determinada, para llevar a acabo un desarrollo en serie de

$$(4.2.16) \quad \frac{d\phi}{d\xi} = \frac{C_\phi + \eta \cos^2 \theta}{g^*(\theta)},$$

para (4.2.16) podemos realizar el desarrollo como antes, sin embargo podemos tomar solo a primer orden pues estamos haciendo la expansión cerca del punto $\theta = 0$ de esta manera, del lado izquierdo tenemos

$$(4.2.17) \quad \frac{d\phi}{d\xi} \approx \frac{\Delta\phi}{\Delta\xi} = \frac{m_\phi\pi}{1},$$

y para el lado derecho de (4.2.16)

$$(4.2.18) \quad \frac{C_\phi + \eta \cos^2 \theta}{g^*(\theta)} \approx \frac{C_\phi + \eta}{k_2},$$

entonces $C_\phi \approx k_2 m_\phi \pi - \eta$, la sustituimos en la (4.2.15), de donde finalmente podemos obtener

$$(4.2.19) \quad \zeta_0 \approx \pi(\pi + m_\phi^2 \pi(k_3 - k_2) + 2m_\phi \eta)$$

donde $k_{2,3} = K_{2,3}/K_1$.

La expresión que acabamos de encontrar (4.2.19) será de suma utilidad para determinar cualitativamente que ocurre por arriba de este campo y por debajo también, como veremos en el próximo capítulo.

Capítulo 5

Resultados

En esta sección mostraremos los resultado que obtuvimos al resolver el sistema (4.1.72) expresado en la sección (4.1) bajo las consideraciones hechas en el capítulo anterior. Nuestro interés está enfocado principalmente en como responde nuestro sistema ante la presencia de un campo eléctrico adimensional ζ , como mencionamos en la sección anterior para que sea posible resolver nuestro sistema (4.1.72) es necesario que establezcamos valores para tres variables, con ello el sistema consta de dos ecuaciones y dos variables. La complejidad del sistema limita abordarlo de manera completamente numérica, pues en nuestro análisis de este sistema encontramos que la soluciones dependen fuertemente de los parámetros enteros n y m_ϕ mediante una exploración arbitraria de estos valores encontramos la configuración $n = 25$ y $m_\phi = 27$, una vez fijados esto valores comenzamos a ajustar los parámetros restantes, además fijamos el radio de confinamiento como $d/p = 10$ para todas las soluciones que encontramos. Tomemos ahora las variables G^* , C_ϕ , ζ , de las cuales elegimos $\zeta \geq 0$ fijo para cada solución, la restricción sobre ζ corresponde al hecho que este parámetro involucra el cuadrado del campo eléctrico, con ello nuestro sistema adquiere la siguiente forma

$$(5.0.1) \quad \begin{aligned} q(G^*, C_\phi) &= 0 \\ s(G^*, C_\phi) &= 0, \end{aligned}$$

la expresión (5.0.1) nos permite usar algún método numérico para encontrar soluciones a este sistema pues ahora tenemos dos ecuaciones y dos variables, a continuación fijamos el valor de la constante G^* pues los ceros obtenidos por el método de NR (el método fue desarrollado en el software Mathematica [30]), fueron del orden $\sim 10^{-3}$. Debido a que nuestra solución es mediante un método numérico no es posible obtener un cero analítico por ello es necesario establecer un intervalo alrededor de este cero exacto, así los valores encontrados numéricamente que estén dentro de dicho intervalo pueden ser consideradas soluciones, para establecer un criterio podemos utilizar el siguiente hecho: ya que hemos adimensionalizado nuestras ecuaciones integrales, nuestros ceros numéricos pueden ser comparados

con la unidad. Una vez fijado el valor G^* , fue posible tener ahora el sistema

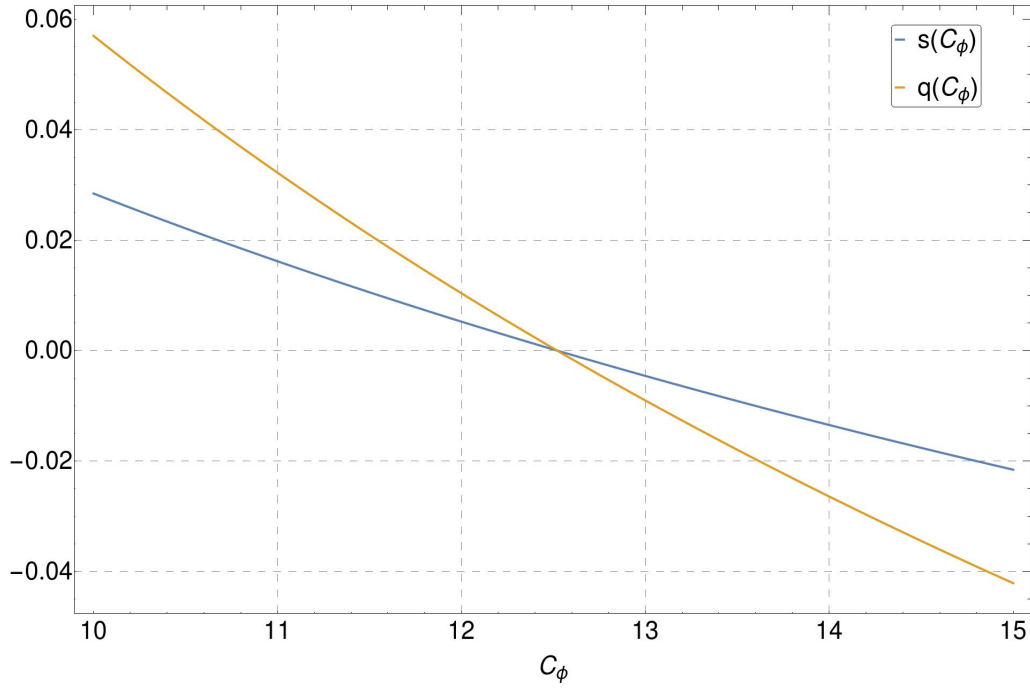


Figura 5.0.1: Intersección de las funciones $q(C_\phi)$ y $s(C_\phi)$ simultáneamente con en el origen implican la solución del sistema (5.0.2).

$$(5.0.2) \quad \begin{aligned} q(C_\phi) &= 0 \\ s(C_\phi) &= 0. \end{aligned}$$

Este sistema se puede graficar como observamos en la figura (5.0.1), de esta manera es posible visualizar la intersección de ambas curvas de (5.0.2) finalmente mediante el ajuste tanto de G^* y C_ϕ fue posible obtener ceros del orden $\sim 10^{-12}$ de (5.0.2), que al compararlo con la unidad el error es muy pequeño, este criterio fue el utilizado para cada solución que encontramos. Por otro lado para las soluciones del método de Cardano, las cuales definen tanto los límites de integración, como los puntos de retorno deben corresponder efectivamente a valores reales, sin embargo obtuvimos valores complejos, la parte imaginaria por ejemplo de $\arcsin(\pm\sqrt{x_i}) = a + jb$, b es aproximadamente del orden $|b| \sim 10^{-12}$, por lo que podemos tomar únicamente la parte real. Con este procedimiento podemos ir variando la intensidad de ζ y asegurar que las soluciones encontradas corresponden a texturas, es decir, son configuraciones en equilibrio. En la figura (5.0.2) podemos observar algunas curvas del espacio fase, estas curvas son soluciones del sistema (4.1.65) que se definen cuando imponemos sus parámetros correspondientes.

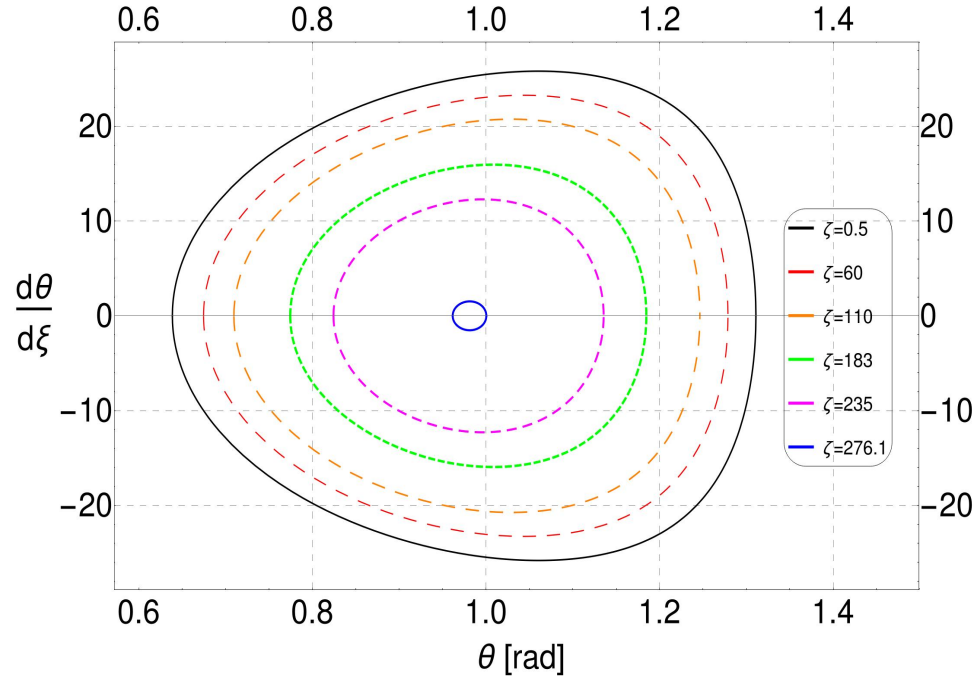


Figura 5.0.2: Región del espacio fase $\frac{d\theta}{d\xi}$ versus θ que determinan las curvas obtenidas de la ecuación (4.1.17) para diferentes valores de ζ que satisfacen sus respectivas condiciones de frontera con valores $n = 25$ y $m_\phi = 27$ de θ y ϕ respectivamente.

El procedimiento descrito anteriormente para encontrar la solución del sistema (5.0.2) puede extenderse. Para encontrar otras soluciones del sistema en equilibrio podemos ir variando el parámetro ζ en el sistema de ecuaciones, sin embargo la variación de este parámetro de campo eléctrico adimensional implica el reajuste de los parámetros restantes, en la figura (5.0.3) observamos la variación del parámetro C_ϕ respecto a ζ por el hecho de variar su intensidad, el proceso para encontrar esta curva fue el siguiente: Una vez que encontramos una configuración que satisface el sistema (4.1.72) variamos el parámetro $\zeta = \zeta_0 \pm \delta$ donde ζ_0 es el parámetro inicial (que sí satisface el sistema (4.1.72)) y $\delta \sim 0.5$, ahora el nuevo valor que toma ζ no satisface el sistema, pero mediante el ajuste $C_\phi = C_\phi^{(0)} \pm \epsilon$ (donde $C_\phi^{(0)}$ sí satisface el sistema) con ϵ pequeño y real mediante el método de NR es posible obtener una nueva solución del sistema, este procedimiento lo realizamos reiterativamente. Notemos que en algún momento de este procedimiento obtenemos el valor $\zeta = 0$, por la discusión hecha en (4.1.1) a lo largo de este trabajo únicamente se estudiaron las curvas con campos eléctricos no nulos ($\zeta > 0$). Cada punto sobre la curva (5.0.3) corresponde a una pareja (C_ϕ, ζ) que es solución del sistema de ecuaciones (4.1.72)

El proceso descrito anteriormente, que mediante el método de NR ajustamos

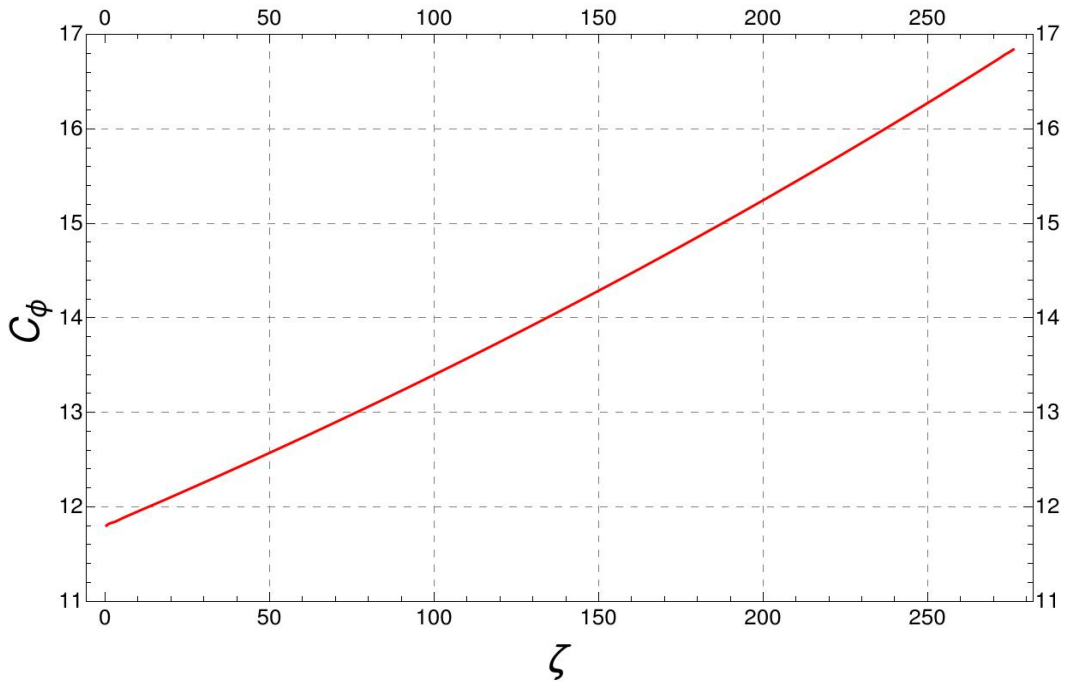


Figura 5.0.3: Curva que muestra el comportamiento del parámetro C_ϕ al variar ζ , parámetro que involucra el cuadrado de la intensidad del campo eléctrico (E_0^2). Cada pareja (C_ϕ, ζ) corresponde a una solución del sistema de ecuaciones (4.1.72), solución que determina el estado de equilibrio o textura de la fase colestérica confinada entre placas paralelas con condiciones de frontera fuertes sometidas a un campo eléctrico perpendicular a las placas.

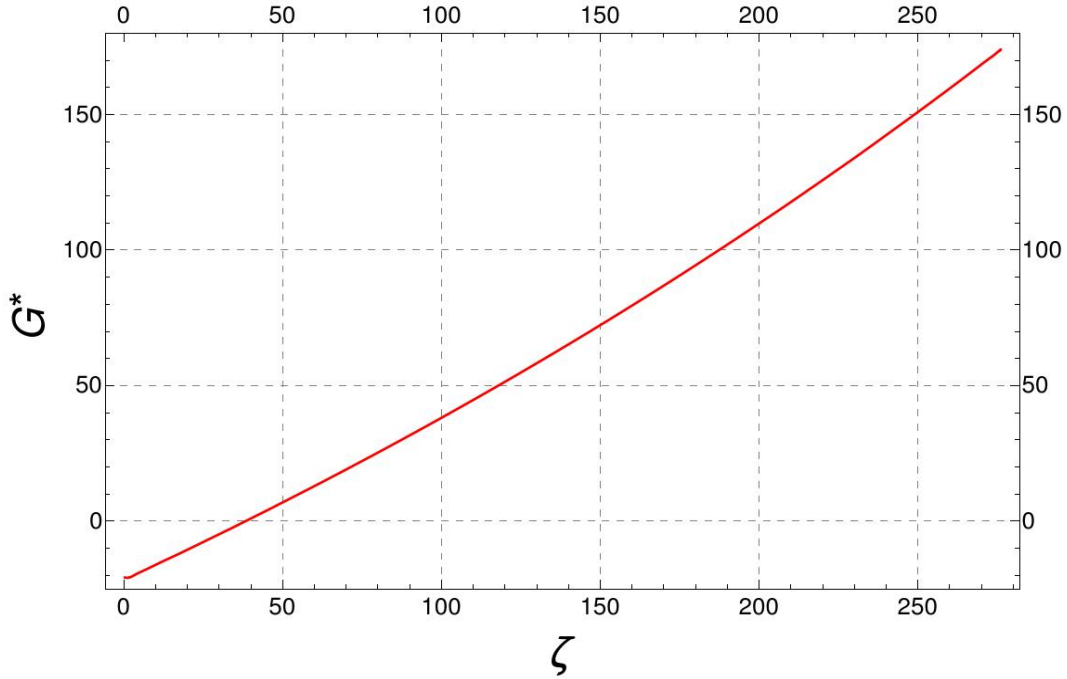


Figura 5.0.4: Curva que muestra el comportamiento del parámetro G^* al variar ζ , parámetro que involucra el cuadrado de la intensidad del campo eléctrico (E_0^2). Cada pareja ordenada (ζ, G^*) corresponde a una solución del sistema de ecuaciones (4.1.72), solución que determina el estado de equilibrio o textura de la fase colestérica confinada entre placas paralelas con condiciones de frontera fuertes sometidas a un campo eléctrico perpendicular a las placas.

C_ϕ nos proporcionó simultáneamente el valor para G^* , para cada incremento de δ en el parámetro ζ , de esta manera podemos también observar el comportamiento de G^* en función de ζ (el campo eléctrico adimensional) como se muestra en la curva (5.0.4).

También observamos que al cambiar las constantes elásticas de Frank (K_i) para otras sustancias orgánicas como *MBBA* y *PAA* [18] las curvas del espacio fase también giran también entorno a un θ_e , ángulo que ya discutimos en la sección (4.1.1), además cuando aumentamos la intensidad del campo eléctrico los puntos de retorno $\theta_{0,1} \rightarrow \theta_e$ para cada configuración correspondiente tanto para *5CB* como para *MBBA* y *PAA*. En resumen observamos que al aumentar la intensidad del campo eléctrico los puntos de retorno que son dos ($\theta_{0,1}$) tienden únicamente a uno (θ_e) a lo largo del eje ξ perpendicular a las placas paralelas.

El ángulo θ_e que hemos discutido anteriormente se puede encontrar de la siguiente manera: de la ecuación (4.1.16) observamos que la expresión

$$(5.0.3) \quad V(\theta) \equiv \frac{(C_\phi + \eta \cos^2 \theta)^2}{g^*(\theta)} + \zeta \sin^2 \theta + \Sigma,$$

con $\Sigma \equiv -K\eta^2$, es una especie de potencial, y justamente de esta encontramos los puntos de retorno cuando $V(\theta_{0,1}) - G^* = 0$.

Antes de continuar es necesario hacer una aclaración pues a lo largo de este trabajo hemos recurrido frecuentemente a la mecánica clásica por las similitudes matemáticas con nuestro sistema mesofásico, sin embargo debemos ser cuidadosos al interpretar el sentido físico propio la fase colestérica aquí estudiada, un ejemplo de ello es que en el caso de un sistema mecánico cuando el hamiltoniano no depende explícitamente del tiempo t , dicho hamiltoniano corresponde a la energía total del sistema [25], en el Capítulo 2, hicimos la asociación $t \leftrightarrow z$, y encontramos que la ecuación (4.1.8) no depende explícitamente de z por ello podríamos afirmar que la variable H_0 de dicha expresión corresponde a la energía total de nuestro sistema mesofásico, y que por lo tanto sus valores posibles son $H_0 \geq 0$. Esta interpretación es incorrecta pues, en mecánica clásica el valor extremal se realiza sobre la acción F , mientras que en nuestro medio continuo mesofásico fue la energía libre total por unidad de área \mathcal{F} , de donde implicaron las ecuaciones de EL, que dependen de f_T que es una especie de densidad lagrangiana, por ello es que para nuestro caso, un medio continuo, los valores posibles de H_0 son todos los reales y no corresponden a la energía total, H_0 es una constante de integración.

Podemos ahora graficar la función (5.0.3) para los valores de los parámetros utilizados para las curvas en la figura (5.0.2), los cuales definen las curvas presentadas en la figura (5.0.5). En la sección (4.2) cuando hablamos de la curva del espacio fase la cual quedaba definida entre los dos puntos de retorno correspondientes a cada curva, mencionamos que esta curva estaba bien definida, con la ayuda de la figura (5.0.5) podemos entender a que nos referíamos pues en ella ponemos observar que una vez que encontremos el valor de G^* para que se cumpla $V(\theta_{0,1}) - G^* = 0$ los puntos de retorno que se definen están entre valores reales de esta curva como se puede observar, ese valor de G^* (el valor de G^* , en analogía en la mecánica clásica, es similar a la energía mecánica que se representa como una línea horizontal que representa el valor de la energía que se brinda al sistema subiendo o bajando esta línea a lo largo del eje V del potencial).

De la expresión (5.0.3) podemos observar que $g^*(\beta) = 0$ cuando $\beta = \pi(2l+1)/2$ donde l es un número entero, en la figura (5.0.5) observamos que para $l = 0$ tenemos que $g(\pi/2) = 0$ y por lo tanto $V(\pi/2) \rightarrow \infty$. Esta especie de potencial diverge en $\pi/2$, en esta esta región el potencial es repulsivo, es decir, es un punto inestable. Podemos interpretar esta singularidad de la siguiente manera: al ser un punto inestable muestra que la configuración rechaza adquirir esta dirección, es decir, el vector director no admite orientarse en la dirección $\pi/2$. Esta restricción también nos dice que no puede existir para las configuraciones que estamos trabajando (aquellas que satisfacen el sistema de ecuaciones (4.1.65)), una transición

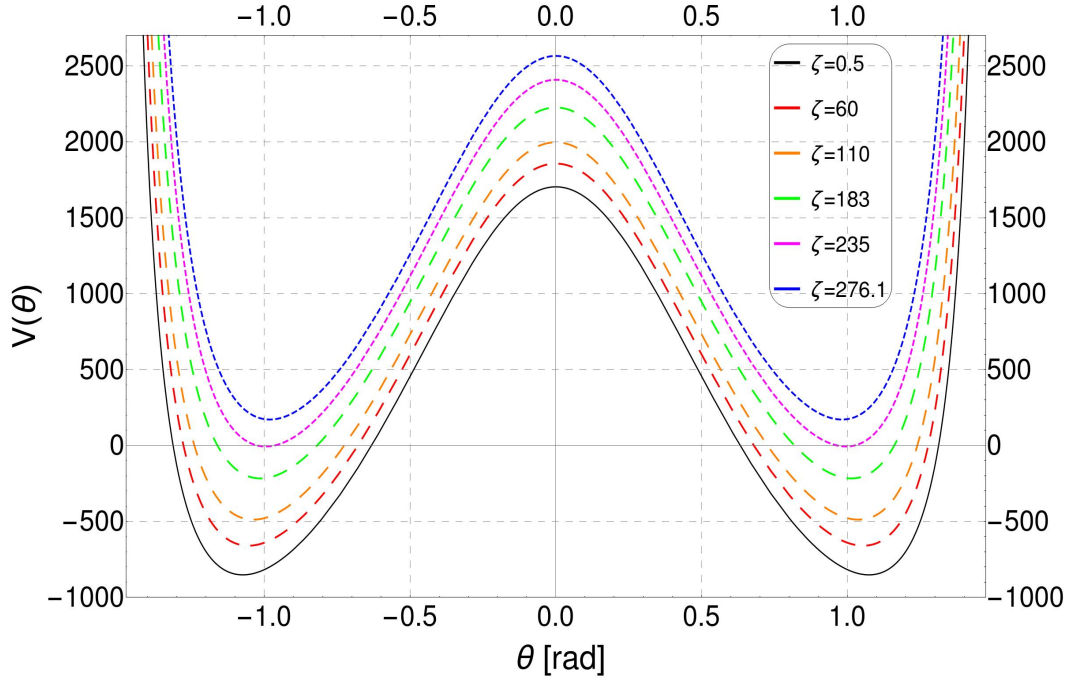


Figura 5.0.5: Curvas de la ecuación (5.0.3) para diferentes valores del campo adimensional ζ

de la fase colestérica inicial a una fase nemática.

Podemos encontrar de forma anítica el ángulo θ_e mediante $V(\theta)$, de la manera usual para encontrar un máximo de una función, tomando su derivada e igualando a cero, es decir, $V'(\theta) = 0$ y el criterio de la segunda derivada. En la figura (5.0.6) presentamos las curvas que obtuvimos de la derivada de la función (5.0.3), cada curva presentada corresponde a diferentes parámetros que satisfacen el sistema (4.1.72) al igual que en la figura (5.0.5). Notamos que para valores de $\theta > 0$ donde las curvas cruzan el eje θ son los valores correspondientes a los θ_e de cada curva del espacio fase de la figura (5.0.2) y nuevamente en $\pi/2$ la derivada diverge.

Hasta ahora hemos encontrado soluciones a nuestro sistema (4.1.72) que nos proporcionaron información de su geometría en el espacio fase, ahora estamos interesados en observar el comportamiento del ángulo de inclinación θ a lo largo de las placas paralelas, es decir, a lo largo del eje ξ . En la figura (5.0.7) observamos el comportamiento del ángulo de inclinación θ a lo largo de las placas paralelas, es decir, en $0 \leq \xi \leq 1$, la construcción de esta gráfica fue realizada con el procedimiento descrito en la sección (4.1.1), el comportamiento de esta curva tiene gran similitud con las soluciones de un oscilador armónico simple, en el sentido de que oscila a lo largo de un punto de equilibrio, en este caso el ángulo ampliamente discutido con anterioridad, θ_e . Notamos también que el número $n = 25$ de la expresión (4.1.47) se corresponde al número de veces que la curva cruza el eje del

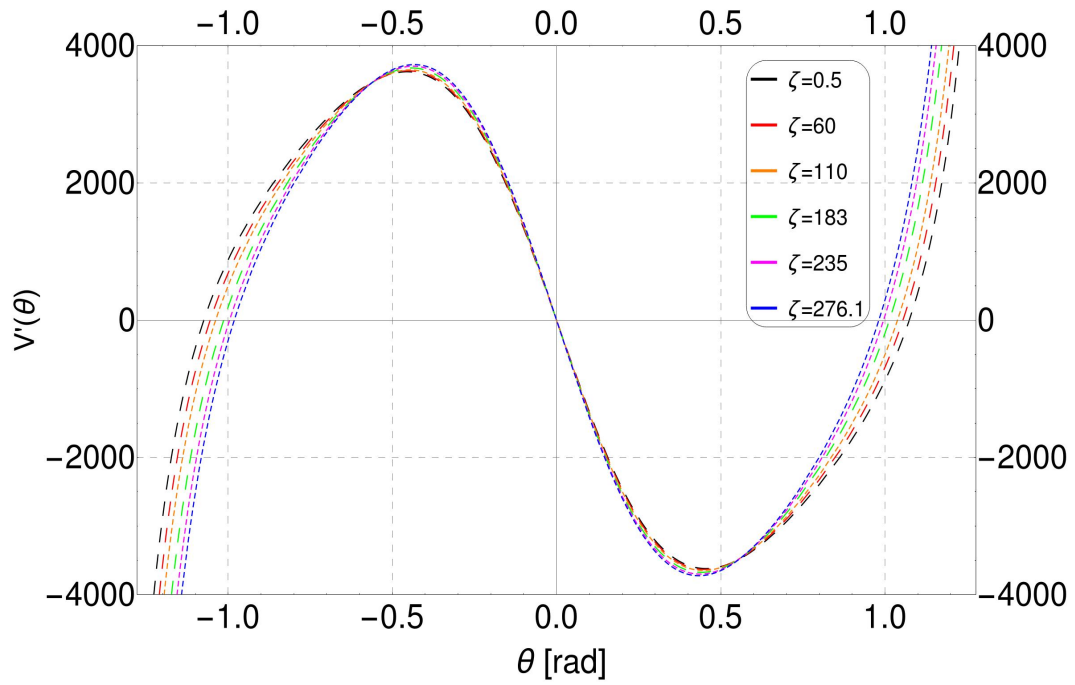


Figura 5.0.6: Curvas de la derivada de la ecuación (5.0.3) para diferentes valores del campo adimensional ζ

ángulo $\theta_e \sim 1.04721$ para esta configuración. Los parámetros de la figura anterior son soluciones del sistema de ecuaciones (4.1.72).

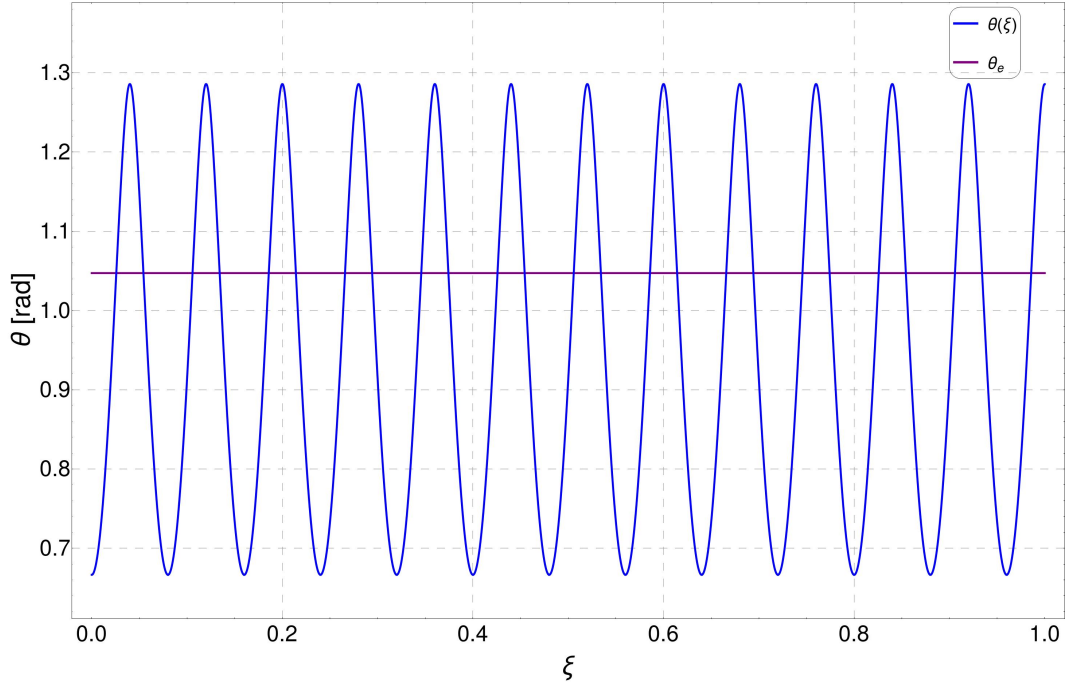


Figura 5.0.7: Variación del ángulo de inclinación $\theta(\xi)$, $0 \leq \xi \leq 1$ de la textura colestérica a lo largo del eje ξ perpendicular a las placas paralelas sometidas a un campo eléctrico externo \mathbf{E} (paralelo a al eje ξ), con $\zeta = 47.26$, $C_\phi = 12.5204$ y $G^* = 5$, que oscila entorno al ángulo específico $\theta_e \sim 1.04721$, con condiciones de frontera fuertes $\theta_0 \approx 0.6664$ y $\theta_1 \approx 1.2860$ en $\xi = 0, 1$ respectivamente.

En el Capítulo 3 sección (3.2) discutimos sobre el efecto Fredericksz y observamos el comportamiento de soluciones $\theta(\bar{z})$ en presencia del campo magnético adimensional \bar{H} para diferentes valores, véase figura (3.2.2), mientras la intensidad de este campo externo va en aumento las curvas adquieren una configuración diferente, por ello se espera que para un campo muy intenso la configuración tomará el ángulo $\theta = \pi/2$.

Ahora miremos las curvas de la figura (5.0.8), en ella observamos las soluciones $\theta(\xi)$ para diferentes intensidades de campo eléctrico adimensional ζ . En principio podríamos pensar que dada una solución del sistema de ecuaciones (4.1.72), que tiene ya bien definidos sus parámetros C_ϕ , G^* , n , m_ϕ bastaría ir variando ζ hasta ver los efectos causados sobre la configuración inicial, sin embargo la variación de ζ implica, como ya vimos, un reajuste de estos parámetros excepto para n y m_ϕ , a su vez las condiciones de frontera van modificándose conforme estos parámetros se van ajustando, a diferencia de la figura (3.2.2) en donde las condiciones de frontera se mantienen fijas para diferentes valores de \bar{H} , en este caso las condiciones de frontera siguen manteniendo su valor a pesar de la variación de \bar{H} , es decir se cumple anclaje fuerte. En la figura (5.0.8) graficamos únicamente una región

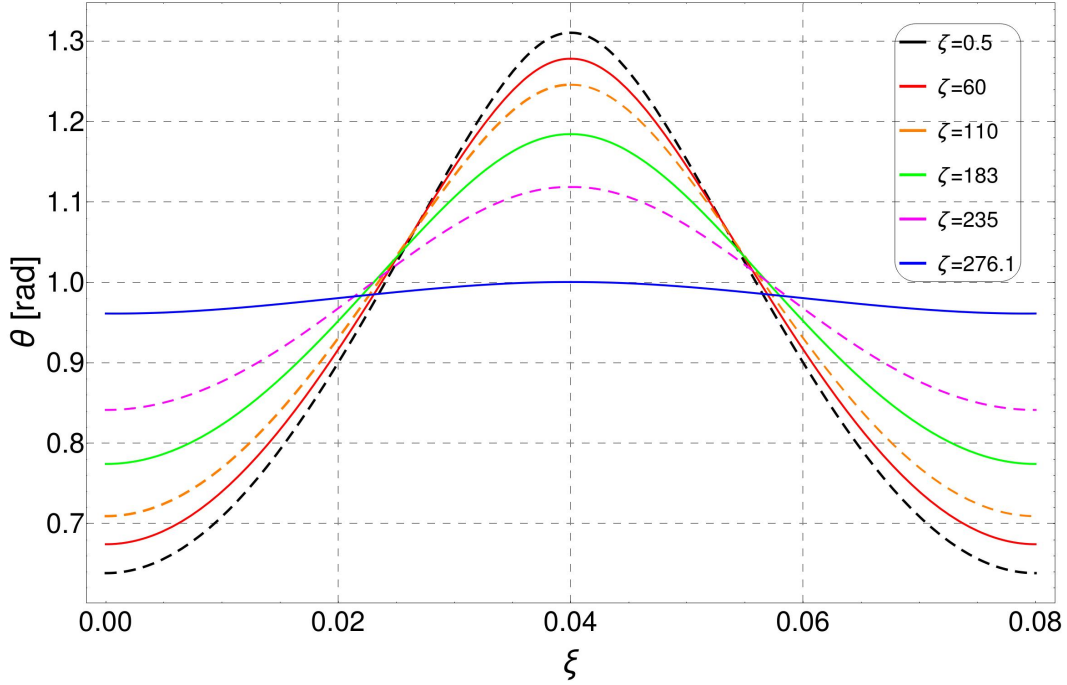


Figura 5.0.8: Variación del ángulo de inclinación $\theta(\xi)$, $0 \leq \xi \leq 0.08$ de la textura colestérica a lo largo del eje ξ perpendicular a las placas paralelas sometidas a un campo eléctrico externo adimensional ζ (paralelo a al eje ξ).

de las soluciones de $\theta(\xi)$ vs ξ (con $0 \leq \xi \leq 0.08$) en ellas podemos observar diferentes soluciones del sistema (4.1.72) cada una de las soluciones tiene diferentes valores para θ_0 , es decir, que no satisface anclaje fuerte cuando aumentamos el valor de ζ . Mientras el campo eléctrico adimensional va aumentando en intensidad es necesario que estas condiciones de frontera se ajusten para que pueda existir una configuración de equilibrio de la textura colestérica, cumpliéndose el sistema (4.1.65) para todas las soluciones presentadas. Observamos también que para campos externos relativamente grandes las oscilaciones gradualmente van disminuyendo hasta tender a una solución constante es decir, $\theta(\xi) \rightarrow const$. Estos resultados además muestran que para que la densidad de energía libre f_T de la fase colestérica sea mínima es necesario que las condiciones de frontera impuestas $\theta_{0,1}$ cambien según la intensidad del campo eléctrico adimensional ζ , por lo tanto no satisfacen el anclaje fuerte impuesto como condiciones planares pues recordemos que impusimos la dirección de tendencia \mathbf{n}_0 paralela a las placas paralelas, es decir, que en el espacio fase en algún momento $\theta = 0$ lo cual no pasa en las soluciones de la figura (5.0.8), es decir no se anclan todos las soluciones a un solo valor θ_0 y θ_1 como esperabamos.

Podría pensarse que para llegar a estas conclusiones no era necesario desarrollar los cálculos anteriores, y que simplemente a partir de las soluciones del método

de Cardano era posible concluir que las condiciones $\theta_{0,1}$ variaban, en otras palabras, no se fijan a un valor pues dependen de los parámetros (C_ϕ, G^*, ζ) , además las soluciones del método de Cardano son indirectamente soluciones de la ecuación diferencial (4.1.16) cuando $\theta'|_{\xi=0,1} = 0$ por construcción, sin embargo estas no son soluciones del sistema (4.1.65) y aunque observamos que no se fijan, no es posible asegurar que para algún valor de la intensidad del campo externo estas condiciones sí se fijarían. A pesar de ello no fue posible seguir estudiando las configuraciones para intensidades de campo más grandes pues los valores de las curvas en el espacio fase eran complejos debido al método para encontrar soluciones mediante modificaciones pequeñas de ζ y el reajuste de los demás parámetros. Es posible, sin embargo encontrar el valor aproximado del campo externo ζ en el que sí se cumplen estas condiciones, y que además nos brinde una idea de la magnitud de dicho campo mediante la expresión del campo umbral adimensional desarrollada en la sección (4.2) para ζ_0 , es decir:

$$(5.0.4) \quad \zeta_0 = \pi(\pi + m_\phi^2 \pi(k_3 - k_2) + 2m_\phi \eta),$$

encontramos que el valor aproximado de este campo umbral es $\zeta_0 \approx 7179.02$, este valor del campo implica una transición de fase como observamos en la figura (5.0.9) donde podemos notar que para valores $\zeta = 5, 500, 1000$, obtenemos curvas similares a las encontradas en la figura (5.0.2), mientras que para valores aproximadamente mayores a $\zeta_h = 6200$ se comienza a observar un cambio significativo, pues en este valor los ángulos $\theta_{0,1}$ en las fronteras ya son fijos, y para valores por debajo de ζ_h el valor de estos ángulos en las fronteras corresponde al anclaje débil. También observamos que el ángulo de inclinación θ cruza el origen para algún valor de θ' para ζ_h lo cual es consistente con la condición de dirección de tendencia \mathbf{n}_0 . Notemos que el valor $\zeta_0 \neq \zeta_h$, lo cual es de esperarse por las aproximaciones que tomamos para encontrar una expresión analítica del campo umbral ζ_0 , sin embargo del mismo orden, además de que el valor de ζ_0 nos indicó la existencia de la transición de fase. Es importante aclarar que las curvas en (5.0.9) no satisfacen el sistema (4.1.65), sin embargo esto no implica que no sean texturas colestéricas, como veremos a continuación.

Como resultado de tomar la aproximación

$$(5.0.5) \quad \frac{1}{w^*} \frac{d\theta}{d\xi} \Big|_{\xi=0,1} \rightarrow 0,$$

afirmamos que nuestra aproximación de anclaje fuerte mediante el anclaje débil tomando $w^* \rightarrow \infty$ implica que

$$(5.0.6) \quad \frac{d\theta}{d\xi} \Big|_{\xi=0,1} \rightarrow \infty,$$

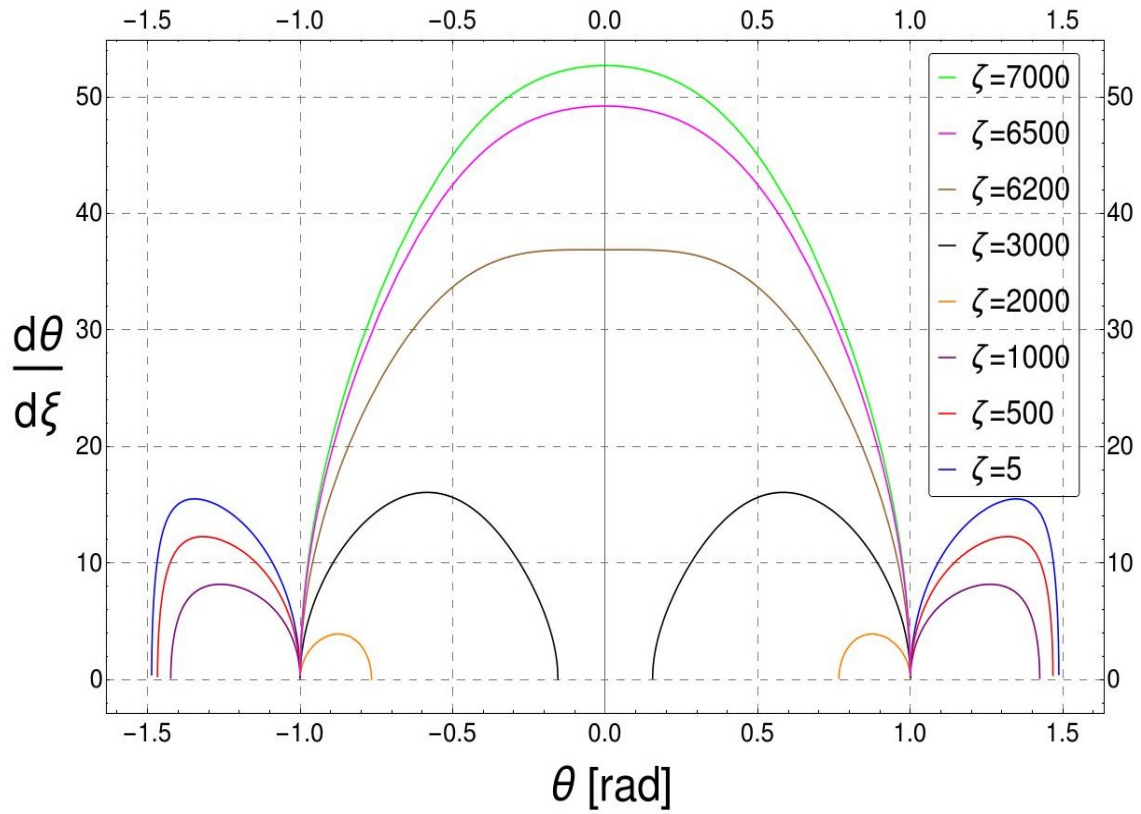


Figura 5.0.9: Región del espacio fase θ' vs θ . Se observa que para valores del campo eléctrico adimensional menores a $\zeta_h = 6200$: las curvas están sometidas a condiciones variables (Anclaje débil), mientras que para valores de superiores las curvas satisfacen condiciones fijas (Anclaje fuerte).

este límite en las fronteras nos proporcionó los valores de $\theta_{0,1}$ fijos como consecuencia de la ecuación (5.0.6), sin embargo esta expresión fue insertada en las expresiones $\Delta(\theta_0, \phi_0)$ y $\Delta(\theta_1, \phi_1)$, de donde establecimos la condición (5.0.7)

$$(5.0.7) \quad \theta_0 = \theta_1 + n\pi$$

como consecuencia de (5.0.6) $\Delta(\theta_0, \phi_0)$ y $\Delta(\theta_1, \phi_1)$ se indefinen, para evitarlo las soluciones de (4.1.65) se ven forzadas a configurarse mediante anclaje débil como lo exhiben los diferentes valores de $\theta_{0,1}$ para cada configuración como podemos ver en la figura (5.0.2), es decir no se fijan las condiciones en $\xi = 0, 1$, en consecuencia el sistema (4.1.65) es válido solo para anclaje débil, en otras palabras, es necesario imponer el anclaje fuerte externamente.

Para encontrar soluciones de (4.1.65) los valores de los parámetros C_ϕ y G^* son diferentes para cada solución a causa de variar ζ , ello era completamente necesario para darle solución al sistema así planteado, por otro lado para la ecuación diferencial (4.1.16) encontramos que estos parámetros también varían y sin embargo los valores $\theta_{0,1}$ son fijos para valores $\zeta \geq \zeta_h$, podemos darnos una idea del valor de estos parámetros al mirar las curvas de la figura (5.0.9), en puntos donde $\theta'(\theta = \theta_{0,1}) = 0$ y con la ayuda de la ecuación diferencial (4.1.16) de aquí obtenemos

$$(5.0.8) \quad \frac{(C_\phi + \eta \cos^2 \theta_{0,1})^2}{g^*(\theta_{0,1})} + \zeta \sin^2 \theta_{0,1} = \Omega,$$

con $\Omega \equiv G^* + K\eta^2$, si imponemos externamente el valor de $\theta_{0,1}$ obtenemos el valor de las constantes C_ϕ y Ω , (pues tenemos un sistema de dos ecuaciones con dos variables) para una curva con un valor específico de ζ , si variamos la intensidad del campo estas constantes cambian pero los valores de $\theta_{0,1}$ ya no para cualquier intensidad del campo externo mayor al campo umbral, con estas condiciones de anclaje fuerte, además observemos que se sigue cumpliendo la condición

$$(5.0.9) \quad \theta_0 = \theta_1 + n\pi,$$

pero no necesariamente n entero. La gráfica $\theta = \theta_{num}(\xi)$ se puede encontrar mediante algún método numérico que resuelva la ecuación diferencial (4.1.16) con condiciones fijas en las fronteras, una vez encontrada $\theta_{num}(\xi)$ puede ser utilizada para encontrar la solución numérica de (4.1.20) de la siguiente manera

$$(5.0.10) \quad \frac{d\phi}{d\xi} = \frac{C_\phi + \eta \cos^2(\theta_{num}(\xi))}{g^*(\theta_{num}(\xi))}$$

Por último, a lo largo de este trabajo tomamos un valor fijo para el parámetro η , sin embargo puede tomarse cualquiera arbitrariamente, en nuestros resultado obtenidos encontramos que para las configuraciones en equilibrio del sistema

(4.1.65) el valor del pitch p ya sometido al campo externo se contrajo para poder llegar a un estado de equilibrio, para valores más grandes de η es de esperarse que para encontrar soluciones con anclaje fuerte impuestas externamente la intensidad del campo eléctrico externo deber ser mayor pues ζ_0 es proporcional a η .

Conclusiones

El estudio de los Cristales Líquidos, en particular la fase colestérica (N^*) aquí estudiada, desde principios del siglo pasado y el presente sigue siendo de particular interés para diferentes situaciones físicas, como por ejemplo las recientes investigaciones sobre la propagación de ondas electromagnéticas a través de estas sustancias [32]. En la presente tesis elegimos trabajar con la fase N^* pues hasta donde sabemos no hay investigaciones que realicen un análisis del espacio fase. En particular el estudio de las configuraciones se refiere a problemas de condiciones en la frontera cuyo estudio en el espacio fase no ha sido analizado, dicho espacio fase presenta una riqueza geométrica que brinda información relevante sobre el desarrollo de las configuraciones sometidas a diferentes tipos de perturbaciones externas, además el análisis desde el espacio fase resulta de suma importancia para situaciones en las que no es sencillo resolver un sistema de ecuaciones diferenciales cuando se investigan ciertas texturas, ya que generalmente la única vía para resolver tal sistema es mediante métodos numéricos. Sin embargo resolver una ecuación diferencial de forma numérica deja de lado toda la familia de posibles soluciones limitándose a valores específicos de los parámetros considerados. En este trabajo fue necesario recurrir a métodos numéricos y de cierta manera robustecer los resultados mediante aproximaciones analíticas, como desarrollos en series de Taylor etc.

La presente investigación aporta un nuevo enfoque en el análisis de configuraciones colestéricas desde la perspectiva del espacio fase, nuestro objetivo fue describir el sistema de texturas colestéricas confinada entre placas paralelas, cuando esta mesofase se somete a un campo eléctrico externo con dirección perpendicular a las placas, las investigaciones sobre efectos de campos externos aplicados a muestras de cristales líquidos colestéricos ya han sido reportadas en la literatura, sin embargo bajo esta nueva perspectiva del espacio fase los principales resultados obtenidos a lo largo de esta investigación para anclaje planar arbitrario muestran que *a)* imponer anclaje débil sobre las placas de la muestra implica un sistema de ecuaciones integrales del cual se encuentran configuraciones en las que el ángulo de inclinación θ (o ángulo polar) oscila con amplitud pequeña entorno a cierta dirección $\theta \approx 60^\circ$, dando lugar a texturas conocidas en la literatura como cónicas-focales [33], bajo esta condición de anclaje débil los resultados muestran además que para tales texturas hay una contracción del paso de la hélice p como también

ya ha sido reportado por algunos investigadores tanto teórica como experimentalmente, además fue posible establecer las ecuaciones integrales por la simetría del campo eléctrico externo, aplicado a la muestra, *b*) para anclaje fuerte se encuentra una expresión analítica para el campo eléctrico umbral a partir del cual las configuraciones colestéricas se desenrollan en nemáticas, sin embargo para valores por debajo del campo umbral las texturas se someten a anclaje débil para establecer una configuración de mínima energía lo que da como resultado una configuración de equilibrio que no admite ciertas direcciones particulares *c*) las ecuaciones integrales para anclaje débil no convergen al caso de anclaje fuerte haciendo tender las fuerzas de amarre en las fronteras al infinito por lo tanto se tiene convergencia no uniforme, y como consecuencia es necesario imponer las condiciones planares de anclaje fuerte de manera externa.

Posteriores trabajos pueden dirigirse a la investigación de diferentes configuraciones bajo otro tipo de perturbaciones externas, o mediante la variación de los parámetros de control, ya que estos son los principales responsables de las transiciones de fase que se presentan en las diferentes configuraciones, el método expuesto en el presente trabajo puede extenderse para otras mesofases conocidas y para diferentes tipos de interacción entre las fronteras y las muestras de cristal líquido confinadas entre placas paralelas.

Apéndice

Método de Cardano para ecuaciones algebraicas con coeficientes reales.

El método de Cardano para coeficientes reales, permite encontrar soluciones analíticas de un polinomio de tercer grado. Consideremos el polinomio

$$(5.0.11) \quad x^3 + px^2 + qx + r = 0.$$

El método de Cardano para encontrar la soluciones de la ecuación (5.0.11) comienza por realizar la sustitución [31]:

$$(5.0.12) \quad x = y - \frac{p}{3},$$

esto resulta en la ecuación cúbica reducida

$$(5.0.13) \quad y^3 + Py + Q = 0,$$

donde

$$(5.0.14) \quad P = q - \frac{p^2}{3}$$

$$(5.0.15) \quad Q = \frac{2p^3}{27} - \frac{pq}{3} + r$$

Definimos $y = u + v$. Por lo tanto la ecuación (5.0.13) se expresa como

$$(5.0.16) \quad u^3 + v^3 + (3uv + P)(u + v) + Q = 0.$$

Si sustituimos $v = -\frac{P}{3u}$, en la ecuación (5.0.16), entonces obtenemos

$$(5.0.17) \quad u^6 + Qu^3 - \frac{P^3}{27} = 0.$$

De manera análoga, si sustituimos para u en la ecuación (5.0.16), encontramos que

$$(5.0.18) \quad v^6 + Qv^3 - \frac{P^3}{27} = 0$$

las ecuaciones (5.0.17) y (5.0.18) corresponden a ecuaciones cuadráticas para u^3 y v^3 , respectivamente, las soluciones son

$$(5.0.19) \quad u^3 = \frac{1}{2} \left(-Q \pm \sqrt{Q^2 + \frac{4P^3}{27}} \right)$$

$$(5.0.20) \quad v^3 = \frac{1}{2} \left(-Q \pm \sqrt{Q^2 + \frac{4P^3}{27}} \right),$$

ya que u y v no son las mismas, tomamos

$$(5.0.21) \quad u^3 = \frac{1}{2} \left(-Q + \sqrt{Q^2 + \frac{4P^3}{27}} \right)$$

$$(5.0.22) \quad v^3 = \frac{1}{2} \left(-Q - \sqrt{Q^2 + \frac{4P^3}{27}} \right).$$

Entonces

$$(5.0.23) \quad u_n = \omega_n \left[\frac{1}{2} \left(-Q + \sqrt{Q^2 + \frac{4P^3}{27}} \right) \right]^{\frac{1}{3}}$$

$$(5.0.24) \quad v_n = \omega_n \left[\frac{1}{2} \left(-Q - \sqrt{Q^2 + \frac{4P^3}{27}} \right) \right]^{\frac{1}{3}},$$

donde $\omega_n = e^{2\pi in/3}$, con $n = 0, 1, 2$ son las tres raíces cúbicas de (5.0.11), las cuales son

$$\begin{aligned}\omega_0 &= 1 \\ \omega_1 &= \frac{-1 + i\sqrt{3}}{2} = \omega_2^* \\ \omega_2 &= \frac{-1 - i\sqrt{3}}{2} = \omega_1^*.\end{aligned}$$

Por lo tanto las soluciones a las ecuaciones (5.0.21) (5.0.22), son

$$(5.0.25) \quad u_k = \omega_k \left[\frac{1}{2} \left(-Q + \sqrt{Q^2 + \frac{4P^3}{27}} \right) \right]^{\frac{1}{3}}$$

$$(5.0.26) \quad v_k = \omega_k \left[\frac{1}{2} \left(-Q - \sqrt{Q^2 + \frac{4P^3}{27}} \right) \right]^{\frac{1}{3}}.$$

Las raíces de la ecuación (5.0.11) están dadas por $x = u + v - p/3$, ya que existen tres soluciones para u y tres para v , existen nueve combinaciones diferentes de $u + v$. Para determinar cuáles expresiones para u y v de (5.0.11), observemos las expresiones $v = -P/3u$, (5.0.25) y (5.0.26) que el producto $u_k v_k$ deberá satisfacer

$$(5.0.27) \quad u_k v_k = -\omega_m \omega_k \frac{P}{3} = -\frac{P}{3},$$

así, debemos elegir aquellas raíces cúbicas de (5.0.11) que satisfagan $\omega_k \omega_m = 1$, ya que solo $\omega_0 \omega_0 = 1$ y $\omega_1 \omega_2 = \omega_2 \omega_1 = 1$, las tres raíces de la ecuación cúbica (5.0.11) son

$$(5.0.28) \quad \begin{aligned}x_{00} &= u_0 + v_0 - \frac{p}{3} \\ x_{12} &= u_1 + v_2 - \frac{p}{3} \\ x_{21} &= u_2 + v_1 - \frac{p}{3}.\end{aligned}$$

Observamos de (5.0.25) y (5.0.26), que si el discriminante satisface $Q^2 + 4P^3/27 = 0$, entonces $u_1 = v_1$ y $u_2 = v_2$, de donde $x_{21} = x_{12}$. Esto significa que si el discriminante es cero, existen únicamente dos raíces distintas. Por otro lado si las tres se repiten entonces, además de pedir que el discriminante es cero, también necesitamos que $u_0 = v_0 = u_1 = v_1 = u_2 = v_2$. Ahora ya que $\omega_0 \neq \omega_1 \neq \omega_2$, es necesario que $Q = 0$. Puesto que el discriminante es cero esto conduce a $P = 0$ y $u_k = v_k = 0$, entonces $x_{00} = x_{12} = x_{21} = -p/3$.

Los resultado anteriores se pueden obtener con (5.0.14) y (5.0.15), si $P = Q = 0$ podemos reescribir (5.0.23) y (5.0.24), nos permite escribir las ecuación cúbica de la forma $(x + p/3)^3 = 0$. Sí p , q y r (y por lo tanto P y Q) son reales, y el discriminante es negativo, como

$$(5.0.29) \quad u_n = \omega_n \left[\frac{1}{2} \left(-Q + i \sqrt{\left| Q^2 + \frac{4P^3}{27} \right|} \right) \right]^{\frac{1}{3}}$$

$$(5.0.30) \quad v_n = \omega_n \left[\frac{1}{2} \left(-Q - i \sqrt{\left| Q^2 + \frac{4P^3}{27} \right|} \right) \right]^{\frac{1}{3}} = u_n^*.$$

Entonces

$$(5.0.31) \quad \begin{aligned} x_{00} &= u_0 + v_0 - \frac{p}{3} = u_0 + u_0^* - \frac{p}{3} = 2\text{Re}(u_0) - \frac{p}{3} \\ x_{12} &= \omega_1 u_0 + \omega_2 v_0 - \frac{p}{3} = \omega_1 u_0 + \omega_1^* u_0^* - \frac{p}{3} = 2\text{Re}(\omega_1 u_0) - \frac{p}{3} \\ x_{21} &= \omega_2 u_0 + \omega_1 v_0 - \frac{p}{3} = \omega_2 u_0 + \omega_2^* u_0^* - \frac{p}{3} = 2\text{Re}(\omega_2 u_0) - \frac{p}{3}. \end{aligned}$$

Por lo tanto, cuando el discriminante es negativo, todas las raíces son reales. Sí P y Q son reales y el discriminante es positivo, u_0 y v_0 son reales. Por lo tanto,

$$(5.0.32) \quad \begin{aligned} x_{00} &= u_0 + v_0 - \frac{p}{3} \\ x_{12} &= \omega_1 u_0 + \omega_2 v_0 - \frac{p}{3} = \omega_1 u_0 + \omega_1^* v_0 - \frac{p}{3} \\ x_{21} &= \omega_2 u_0 + \omega_1 v_0 - \frac{p}{3} = \omega_1^* u_0 + \omega_1 v_0 - \frac{p}{3} = x_{12}^*. \end{aligned}$$

Esto significa que cuando el discriminante es positivo, el polinomio tiene una raíz real y dos complejas que son conjugados el uno del otro.

Tomando la expresión

$$(5.0.33) \quad g^*(\theta)(G^* + K\eta^2 - \zeta \sin^2 \theta) - (C_\phi + \eta \cos^2 \theta)^2,$$

hacemos la siguiente simplificación $\alpha = G^* + K\eta^2$. Por otro lado sabemos que $g^*(\theta) = (K_2/K_1) \cos^4 \theta + (K_3/K_1) \sin^2 \theta \cos^2 \theta$, y haciendo $k_2 = K_2/K_1$, $k_3 = K_3/K_1$, tenemos por lo tanto que

$$(5.0.34) \quad p_3(\theta) = (k_2 \cos^4 \theta + k_3 \sin^2 \theta \cos^2 \theta)(\alpha - \zeta \sin^2 \theta) - (C_\phi + \eta \cos^2 \theta)^2,$$

buscamos entonces que $r(\theta) = 0$. Hemos igualado a cero la expresión ya que buscamos las raíces de la expresión anterior. Ahora haremos los siguientes cambios de variable

$$\sin^2 \theta = x ; \cos^2 \theta = 1 - x,$$

de tal manera que se cumple la identidad $\sin^2 \theta + \cos^2 \theta = 1$. Del cambio de variable anterior tenemos que

$$P_3(x) = (k_2(1-x)^2 + k_3(1-x)x)(\alpha - \zeta x) - (C_\phi^2 + 2C_\phi\eta(1-x) + \eta^2(1-x)^2) = 0.$$

Desarrollando y simplificando convenientemente eventualmente llegamos a

$$(5.0.35) \quad \begin{aligned} & x^3 \{ \zeta(k_3 - k_2) \} + x^2 \{ \zeta(2k_2 - k_3) + \alpha(k_2 - k_3) - \eta^2 \} \\ & + x \{ \zeta k_2 + \alpha(k_3 - 2k_2) + 2\eta C_\phi + 2\eta^2 \} + \alpha k_2 \\ & - 2\eta C_\phi - C_\phi - \eta^2 = 0 \end{aligned}$$

Haciendo la siguiente simplificación:

$$\begin{aligned} A &= \zeta(k_3 - k_2) \\ B &= \zeta(2k_2 - k_3) + \alpha(k_2 - k_3) - \eta^2 \\ C &= \zeta k_2 + \alpha(k_3 - 2k_2) + 2\eta C_\phi + 2\eta^2 \\ D &= \alpha k_2 - 2\eta C_\phi - C_\phi - \eta^2 \end{aligned}$$

Por lo tanto tenemos que el polinomio es de tercer grado

$$(5.0.36) \quad Ax^3 + Bx^2 + Cx + D = 0,$$

siempre que $A \neq 0$. Con esta última condición podemos observar que

$$(5.0.37) \quad x^3 + \frac{B}{A}x^2 + \frac{C}{A}x + \frac{D}{A} = 0,$$

si hacemos $p = \frac{B}{A}$, $q = \frac{C}{A}$, $r = \frac{D}{A}$, así

$$(5.0.38) \quad x^3 + px^2 + qx + r = 0$$

De donde encontramos las tres raíces correspondientes mediante el método de Cardano descrito anteriormente:

$$x_{00} = -\frac{p}{3} + \frac{\sqrt[3]{-2p^3 + 3\sqrt{3}\sqrt{4p^3r - p^2q^2 - 18pqr + 4q^3 + 27r^2} + 9pq - 27r}}{3\sqrt[3]{2}} - \frac{\sqrt[3]{2}(3q - p^2)}{3\sqrt[3]{-2p^3 + 3\sqrt{3}\sqrt{4p^3r - p^2q^2 - 18pqr + 4q^3 + 27r^2} + 9pq - 27r}}$$

$$x_{12} = -\frac{p}{3} + \frac{(1 + i\sqrt{3})(3q - p^2)}{(3)^{2^{2/3}}\sqrt[3]{-2p^3 + 3\sqrt{3}\sqrt{4p^3r - p^2q^2 - 18pqr + 4q^3 + 27r^2} + 9pq - 27r}} - \frac{(1 - i\sqrt{3})\sqrt[3]{-2p^3 + 3\sqrt{3}\sqrt{4p^3r - p^2q^2 - 18pqr + 4q^3 + 27r^2} + 9pq - 27r}}{6\sqrt[3]{2}}$$

$$x_{21} = -\frac{p}{3} - \frac{(1 + i\sqrt{3})\sqrt[3]{-2p^3 + 3\sqrt{3}\sqrt{4p^3r - p^2q^2 - 18pqr + 4q^3 + 27r^2} + 9pq - 27r}}{6\sqrt[3]{2}} + \frac{(1 - i\sqrt{3})(3q - p^2)}{(3)^{2^{2/3}}\sqrt[3]{-2p^3 + 3\sqrt{3}\sqrt{4p^3r - p^2q^2 - 18pqr + 4q^3 + 27r^2} + 9pq - 27r}}$$

Bibliografía

- [1] M. De Zwart. *Field-induced distortion of cholesteric liquid crystalline texture*. Radboud University, 1981
- [2] L. M. Blinov and V. G. Chigrinov. *Electrooptic Effects in Liquid Crystals Materials*. Springer, 1994.
- [3] P. G. De Gennes. Calcul de la Distortion d'une Structure Cholesterique par un Champ Magnetique. *Solid State Communications*, 6:163–165, January 1968.
- [4] Robert B. Meyer. Effects of Electric and Magnetic Fields on The Structure of Cholesteric Liquid Crystals. *Applied Physics Letters*, 12(9), May 1968.
- [5] Catherine G. LinHendel. Electric-field-induced Texture and Phase Transformation of Liquid Crystal films. *Journal of Applied Physics*, 53(916), May 1982.
- [6] F. Rondelez G. Durand, L. Leger and M. Veyssie. Magnetically Induced Cholesteric-to-Nematic Phase Transition in Liquid Crystals. *Physical Review Letters*, 22(6), February 1969.
- [7] Robert B. Meyer. Distortion of a Cholesteric Structure by a Magnetic Field. *Applied Physics Letters*, 14(208), 1969.
- [8] Frederic J. Kahn. Electric-field-induced Color Changes and Pitch Dilatation in Cholesteric Liquid Crystals. *Physical Review Letters*, 24(5), 1970.
- [9] Patrick Oswald. Phase Transitions and Unwinding of Cholesteric Liquid Crystals. July 2018.
- [10] C. J. Gerritsma and P. Van Zanten. Electric-field-induced Texture Transformation and Pitch Contraction in a Cholesteric Liquid Crystal. *Molecular Crystals and Liquid Crystals*, 15(3):257–268, 1971.
- [11] P. Ribiere and P. Oswald. Nucleation and Growth of Cholesteric Fingers Under Electric Field. *Journal de Physique*, 51(16):1703–1720, 1990.

-
- [12] Jin-Jei Wu I-An Yao and Shu-Hisa Chen. Observation of Electric-Field Driven Modulated Texture in Cholesteric Liquid Crystal Cells. *Japanese Journal of Applied Physics*, 43(9A):6278–6279, 2004.
- [13] H. Baessler and M. M. Labes. Relationship Between Electric Field Strength and Helix Pitch in Induced Cholesteric-Nematic Phase Transition. *Physical Review Letters*, 21(27):1791–1793, 1968.
- [14] C. J. Gerritsma and P. Van Zanten. Electric-field-induced Texture Transformation and Pitch Contraction in a Cholesteric Liquid Crystal. *Molecular Crystals and Liquid Crystals*, 15(3):257–268, 1971.
- [15] M. De Zwart and Th. W. Lathouwers. Electric-field-induced pitch contraction in the planar cholesteric texture of a liquid crystal with a large negative dielectric anisotropy. *Physics Letters A*, 55(1), 1975.
- [16] J. Brokx and G. Vertogen. On the field-induced cholesteric-nematic transition in cholesteric liquid crystals with homeotropic boundary conditions. *Zeitschrift für Naturforschung A*, 38(1):1–9, 1983.
- [17] M. Kleman and O. D. Lavrentovich. *Soft Matter Physics*. Springer, 2003.
- [18] Iain W. Stewart. *The Static and Dynamic Continuum Theory of Liquid Crystals. A Mathematical Introduction*. Taylor and Francis, 2004.
- [19] T. C. Lubensky P. M Chaikin. *Principles of condensed matter physics*. Cambridge University Press, 1995.
- [20] S.Pikin and L. Blinov. *Cristales Líquidos*. MIR Moscú, 1985.
- [21] S. Chandrasekhar. *Liquid Crystals*. Cambridge University Press, 2nd edition, 1992.
- [22] P.G de Gennes and J. Prost. *The physics of liquid crystals*. Oxford University Press, USA, 1993.
- [23] Leopoldo García-Colín Scherer. *Introducción a la Termodinámica Clásica*. Trillas, 2012.
- [24] Ana Regina Azevedo da Luz Fialho. *Cholesteric liquid crystals confined in toroidal droplets*. PhD thesis, Universidad de Lisboa, 2015.
- [25] John R. Taylor. *Classical Mechanics*. University Science Books, 2005.
- [26] Jorge Ize. *Cálculo de Variaciones*. Departamento de Matemáticas y Mecánica. IIMAS-UNAM FENOMECA, 2da edition, 2002.

- [27] Luiz Roberto Barbero G., Evangelista. *An Elementary Course on the Continuum Theory for Nematic Liquid Crystals*. World Scientific Pub Co Inc, 1998.
- [28] David Griffiths. *Introduction to Electrodynamics*. Prentice Hall, 3rd edition, 1999.
- [29] Wolfram Research, Inc. *Mathematica Documentation*, version 11.0 for Students. Champaign, IL, 2018.
- [30] P. Deuffhard. *Newton Methods for Nonlinear Problems*. Springer, 2004
- [31] Harold Cohen. *Numerical Approximation Methods*. Springer, 2010
- [32] Laura Gómez B. *Propiedades de Propagación de Ondas en Medios Elásticos Estratificados*. Tesis de licenciatura, Universidad Nacional Autónoma de México, 2016.
- [33] J. A. Geurst. Continuum Theory and Focal Conic Texture for Liquid Crystals of the Smectic Mesophase. *Physics Letters* . (34)5, 1971.