

# Universidad de Sonora

*División de Ciencias Exactas y Naturales*



**El Saber de mis Hijos  
hará mi Grandeza**

La ecuación del péndulo no lineal en mecánica  
clásica y en cristales líquidos colestéricos

Tesis

*Presentada al Departamento de Física como requisito para la  
obtención del grado de Licenciado en Física por*

Iván Antonio Cárdenas Muñoz

*Trabajo dirigido por*

*Dr. Arnulfo Castellanos Moreno*

*Hermosillo, Sonora, México*

*Noviembre 2010*

# Universidad de Sonora

Repositorio Institucional UNISON



“El saber de mis hijos  
hará mi grandeza”



Excepto si se señala otra cosa, la licencia del ítem se describe como openAccess

*A mi familia en especial  
a mis hijas Sacbé y Tamara Cárdenas*



# Agradecimientos

Principalmente, agradezco a mis padres por estar conmigo en todo momento, por la educación que me han brindado a lo largo de mi vida, que sin ellos esto no habría sido posible.

Agradezco profundamente a mi director de tesis, Dr. Arnulfo Castellanos Moreno por todo el apoyo que me ha brindado como investigador y persona, por su paciencia y esmero en el trabajo realizado y por supuesto por la oportunidad que me dio al formar parte de su grupo de investigación, con el cual fue posible desarrollar la presente tesis de Licenciatura.

Por otro lado, agradezco a mis sinodales por sus contribuciones y excelentes sugerencias que ayudaron a mejorar este trabajo de tesis.

Finalmente, quiero agradecer a los profesores sus sabios conocimientos que me brindaron durante mi estancia en esta institución.

Iván Antonio Cárdenas Muñoz

# Índice general

Agradecimientos	<i>I</i>
Índice general	<i>II</i>
Índice de figuras	<i>IV</i>
Introducción	1
1 Fenomenología de los cristales líquidos	
1.1 ¿Qué es un cristal líquido?	6
1.2 Componentes estructurales	7
1.3 Clasificación de las fases	10
1.3.1 Fase nemática	11
1.3.2 Fase colestérica	12
1.3.3 Fases esmécticas	14
2 Termodinámica	
2.1 Primera ley de la termodinámica	17
2.2 Segunda ley de la termodinámica	20
2.3 Transformaciones de Legendre y funciones auxiliares	22
2.4 Relaciones de Maxwell	25
3 Teoría de la elasticidad	
3.1 Cinemática	27
3.2 Tensiones	36
3.3 Dinámica y leyes fundamentales	45
3.4 Elasticidad	47
4 Mecánica de los medios continuos	
4.1 Transición de un sistema discreto a uno continuo	56
4.2 Formulación Lagrangiana de los medios continuos	60
4.3 Formulación Hamiltoniana de los medios continuos	63
5 Aplicaciones al cristal líquido colestérico	
5.1 Energía elástica de Frank y Oseen	64
5.2 Ecuación de configuración del colestérico	68

6	Teoría del péndulo	
6.2	Péndulo simple (Lagrange)	74
6.3	Péndulo simple (Hamilton)	79
7	Resultados y conclusiones	
7.1	Graficas de la trayectoria del péndulo en el plano y algunas analogías con el CL colestérico	85
7.2	Grafica del ángulo del péndulo con la vertical y algunas analogías con el CL colestérico	88
	Conclusiones	96
	Apéndice A Funciones elípticas	97
	Bibliografía	104

# Índice de Figuras

I	Esquema del cristal líquido colestérico	
1.1	Ejemplos de moléculas orgánicas que dan lugar a una fase nemática	8
1.2	Fórmula general de los ésteres del colesterol	9
1.3	Dos ejemplos de estructuras moleculares que originan una fase nemática discótica	9
1.4	Aspecto microscópico de las fases nemáticas de moléculas	12
1.5	Esquema de una fase colestérica	13
1.6	Esquema de una fase esméctica A	14
1.7	Esquema de una fase esméctica C	15
3.1	Representación vectorial de los desplazamientos de $\mathbf{x}$ y $\mathbf{u}$	31
4.1	Un sistema discreto de puntos de masa igual conectadas por resortes, como una aproximación a una barra elástica continua	57
5.1	Esquema de la orientación del vector director en la molécula del CL	65
5.2	Estructura de un CL colestérico en el espacio coordenado en presencia de un campo eléctrico uniforme perpendicular a su eje de orientación	68
6.1	Representación del péndulo simple en el plano coordenado	74
6.2	Esquema del péndulo en el plano y las coordenadas generalizadas elegidas para describir su movimiento	79
6.3	Gráfica del movimiento del péndulo plano	84
7.1	Trayectoria cuando la energía inicial del péndulo es suficiente para que la lenteja de una vuelta completa	85
7.2	Trayectorias del péndulo con tres energías diferentes para el caso en que la lenteja da una vuelta completa	86
7.3	Trayectorias del péndulo con energías diferentes	87
7.4	Gráfica del ángulo del péndulo con la vertical	89
7.5	Varias energías de la lenteja del péndulo	90
7.6	Gráfica de comparación cuando el péndulo alcanza la energía más alta	91
7.7	Gráfica de la comparación del CL colestérico y el péndulo plano	92
7.8	Gráfica de comparación a varias energías del CL colestérico	94
7.9	Representación de los tres casos de oscilación para el péndulo plano	95
A.1	Gráfica de la función $sn(x, k)$ de Jacobi	100
A.2	Gráfica de la función $sn^{-1}(x, k)$ de Jacobi	101



# Introducción

En mecánica clásica newtoniana existe un problema que consiste en una partícula sujeta a una barra de longitud  $\ell$  que oscila en un plano en torno a un origen, este problema es el del péndulo simple, y su solución se estudia en los cursos de mecánica de la licenciatura utilizando las diferentes formulaciones de la mecánica clásica. Para pequeñas oscilaciones, es decir para ángulos cuya condición sea  $\theta \sim 0$ , el problema se reduce a resolver una ecuación de segundo grado cuya solución es exacta.

Para el caso más general en que el péndulo presenta oscilaciones finitas, es decir en el rango  $0 \leq \theta \leq 2\pi$ , el problema ya no es tan sencillo, y se tiene que hacer uso de la teoría de las funciones elípticas para obtener la solución exacta. A este caso se le suele llamar el problema del péndulo no lineal. Este problema se ha resuelto de diferentes formas y las vamos a discutir a lo largo del trabajo.

El interés por tomar este problema y desarrollarlo ampliamente surge al observar el comportamiento de un cristal líquido (CL) tipo colestérico en presencia de un campo eléctrico externo. Esta fase de la materia tiene ciertas propiedades que se diferencian de las fases sólida y líquida de la materia, es a lo que se le da el nombre de cristal líquido. Los cristales líquidos son un tipo especial de estado de agregación de la materia que tiene propiedades de las fases líquida y sólida. Los cristales líquidos se clasifican en termotrópicos y liotrópicos. Los llamados cristales líquidos termotrópicos están compuestos generalmente por moléculas con formas de cilindros o discos. Según la temperatura y tipo de moléculas, los cristales líquidos termotrópicos pueden organizarse en diferentes fases: **nemáticas** esta fase presenta una ordenación uniaxial a largo alcance, tiene una viscosidad relativamente baja, lo que le

confiere respuestas rápidas a campos eléctricos externos, **colestéricas** presenta apilamiento de planos moleculares nemáticos con el eje director girado en cada plano de forma helicoidal. El paso de esta hélice depende de la temperatura, **esméticas** son como las nemáticas pero con moléculas ordenadas también en capas normales al eje director o **columnares** estos generalmente son discóticas apiladas unas encima de otras. El otro tipo de CL en cuanto a esta clasificación es el liotrópico, el cual obtiene distintas colocaciones en función del número de moléculas que lo compongan.

El cristal líquido colestérico tiene estructura helicoidal, como el que se presenta en la imagen I

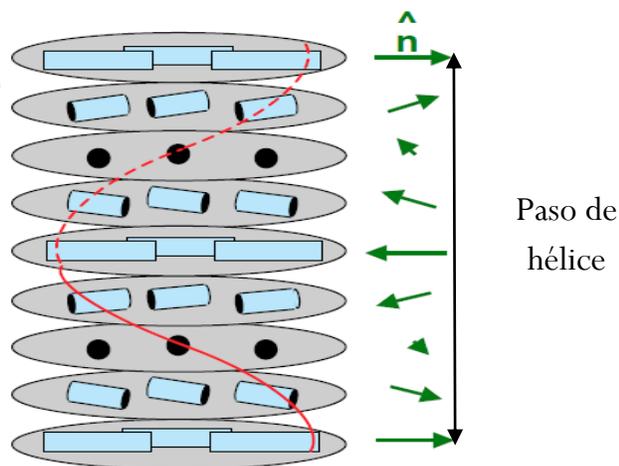


Imagen I

La estructura molecular del CL colestérico cambia su configuración orientacional cuando es sometido a la presencia de un campo eléctrico, el eje de rotación se encuentra localizado en el centro de masa de las moléculas que forman esta fase. El cambio en la orientación en la configuración en torno al eje del centro de masa de la molécula es el que vamos a modelar utilizando la teoría del péndulo no lineal de la mecánica clásica newtoniana.

Se considera que el CL en fase colestérica se puede aproximar a un sólido deformable, y dado que las condiciones de estabilidad en la estructura dependen de la temperatura, nuestro régimen de estudio es también un sistema termodinámico. Para el análisis de la configuración del CL colestérico partimos tomamos como función termodinámica la energía libre de Helmholtz, la cual dependerá del vector director que caracteriza a los CL colestéricos. Incluiremos la contribución debida al campo eléctrico en la densidad de energía libre, obteniendo una expresión total densidad de energía libre. Utilizamos la función de densidad de energía libre y las ecuaciones de Euler-Lagrange para los medios continuos, para obtener la ecuación diferencial que nos describe el cambio en la configuración de la orientación del vector director cuando se encuentra en presencia del campo eléctrico.

Aplicando el formalismo de Lagrange y Hamilton resolvemos el problema del péndulo simple para oscilaciones finitas, observando que para obtener la solución exacta tenemos que hacer referencia a la teoría de las funciones elípticas. Teniendo la ecuación diferencial para el problema del péndulo simple sin restricción en su oscilación, vamos a continuar el tratamiento del problema haciendo las respectivas analogías que se presentan entre este problema y el del CL colestérico en presencia de un campo eléctrico, cuya ecuación diferencial obtuvimos previamente.

La motivación para realizar este estudio nace por la abundancia en la que encontramos este tipo de materiales en la naturaleza, junto con los grandes progresos en la creación de nuevas estructuras en los materiales avanzados y sus posibles aplicaciones.

Para ubicar el problema que vamos a tratar, en el primer capítulo se da una introducción basta sobre la fenomenología de los cristales líquidos, que nos

conducirá a la formalización de la estructura del CL colestérico que vamos a modelar.

Debido a que la teoría que describe la configuración del CLC necesita de una función que es la energía libre de Helmholtz, en el segundo capítulo se presentan las ideas básicas de la termodinámica que nos serán útiles al momento de especificar la naturaleza termodinámica de nuestro sistema.

En el capítulo tercero se muestra la teoría para tratar a la fase colestérica, que por su característica de estructura helicoidal, se supone que se comportan como un sólido deformable. Con estas suposiciones podemos utilizar la teoría de elasticidad para su descripción.

Puesto que se trata de una teoría de la elasticidad, el formalismo matemático de la mecánica de los medios continuos se muestra en el capítulo cuarto, analizamos la forma para pasar de la mecánica clásica de los medios discretos a la formulación de Lagrange y Hamilton cuando tenemos un medio material, es decir, un medio continuo.

En el quinto capítulo desarrollamos los conceptos de la energía elástica de Frank y Oseen y deducimos la ecuación diferencial que nos proporciona la información de los cambios en la configuración del CL colestérico, cuya solución la presentaremos en el capítulo siete en forma gráfica, teniendo en cuenta las condiciones iniciales del problema.

En el capítulo seis nos enfocamos a resolver el problema del péndulo simple, haciendo referencia al apéndice A en el que se plantea una introducción a la teoría de las funciones elípticas que utilizaremos en la solución de la ecuación diferencial para oscilaciones finitas (péndulo no lineal). También discutimos en una sección el enfoque dado por Brizar para el péndulo simple.

Finalmente concluimos el trabajo de tesis con el capítulo séptimo, aquí presentamos las gráficas obtenidas mediante el enfoque numérico de Runge-Kutta de cuarto orden, para la solución de la ecuación diferencial del péndulo simple con oscilaciones finitas. Discutimos los resultados que se obtuvieron mediante este método y la analogía que existe con el cambio en la configuración del CL colestérico sometido a campos eléctricos uniformes y se termina con las conclusiones de este trabajo.

# Capítulo 1

## Fenomenología de los cristales líquidos

### 1.1 ¿Qué es un cristal líquido?

Hasta finales del siglo XIX se pensaba que la materia se mostraba en tres estados o fases: sólido, líquido o gas. Sin embargo, en 1888 el botánico y químico austriaco Friedrich Reinitzer hizo un descubrimiento que iba a cambiar esta concepción. Reinitzer notó un comportamiento anómalo del colesterilbenzoato cuando este pasaba del estado sólido al líquido. El 14 de marzo de 1888 escribió al cristalógrafo Otto Lehmann:

*La sustancia tiene dos puntos de fusión, si se pueden describir de esa forma. A  $145.5^{\circ}\text{C}$  se funde en un fluido neblinoso pero perfectamente líquido, el cual a  $178.50^{\circ}\text{C}$  se vuelve bruscamente claro.*

Tras los posteriores trabajos de Lehmann, Schenk, Vorländer y Friedel, quedó finalmente establecido que las fases intermedias de este y otros compuestos similares constituyen nuevos estados de la materia entre el estado líquido y el estado sólido. Lehmann dio el nombre de cristales líquidos (CL) a estas fases, debido a que en su aspecto externo tienen muchas de las propiedades de los líquidos, mientras que estructuralmente poseen parte de la ordenación que caracteriza los cristales. Aunque éste es el nombre con el que se han popularizado, Friedel propuso la denominación, tal vez más descriptiva, de estados mesomórficos o mesofases, como finalmente se ha dado en llamar técnicamente a la amplia fauna de fases que se catalogan como CL. Para entender el significado de estos nuevos estados de la materia conviene recordar la distinción que existe entre un cristal y un líquido. En un cristal, sus componentes (átomos, moléculas, agregados moleculares, etc.) están dispuestas de modo que sus centros de gravedad ocupan los nodos de una red periódica tridimensional; en un líquido, por el contrario, no existe ningún tipo de ordenación posicional de los centros de gravedad de sus componentes. Mecánicamente esto se traduce en que un líquido fluye, mientras que un cristal es una estructura rígida. La distinción entre ambos es muy clara a la vista de sus respectivos espectros de difracción de rayos X: el

de un cristal muestra unos picos muy definidos denominados picos de Bragg, característicos de la red, que no aparecen en el de un líquido.

A la vista de las propiedades que caracterizan los líquidos y los sólidos podemos inferir dos mecanismos para la aparición de fases intermedias:

- a) Imponiendo un orden posicional en una o dos dimensiones en lugar de en tres. En el primer caso, el que más comúnmente se encuentra en la naturaleza, tendremos un conjunto de capas líquidas equiespaciadas, mientras que en el segundo tendríamos un cristal bidimensional formado por columnas líquidas.
- b) Introduciendo algún grado de libertad adicional como, por ejemplo, la orientación molecular en el caso de un fluido de moléculas no esféricas. Una transición, sin embargo, puede producirse tanto en un cristal como en un líquido. Disminuyendo aún más la temperatura podemos conseguir que, además, las moléculas se orienten en una misma dirección y formen un cristal perfecto. Cuando la anisotropía de las moléculas es muy grande, la transición orientacional se produce siendo la sustancia todavía un líquido, dando lugar a lo que se denomina fluido nemático:

Además de estos dos mecanismos intuitivos por los que pueden aparecer mesofases, la forma particular de las moléculas constituyentes del fluido puede dar lugar a nuevos tipos de mesofases de estructura más compleja. Como criterio general podemos buscar en las asimetrías de las moléculas el origen de nuevas mesofases (una asimetría molecular puede inducir una ruptura de simetría a escala macroscópica y originar así una nueva fase).

## 1.2 Componentes estructurales

Para obtener un cristal líquido es preciso construir un sistema cuyos componentes tengan un alto grado de anisotropía. Hasta el momento, todos los experimentos realizados sobre CL están basados en tres tipos de componentes fundamentales: pequeñas moléculas orgánicas; largas cadenas y agregados moleculares dispuestos en forma de varilla, y estructuras complejas formadas por asociados de moléculas e iones.

Entre las pequeñas moléculas orgánicas los ejemplos clásicos son el p-azoxianisol (PAA) y la p-metoxibencilideno, p-n-butilanilina (MBBA), cuyas fórmulas aparecen en la figura 1.1. Ambas moléculas dan lugar a una fase

nemática en algún rango de temperaturas (por ejemplo, la MBBA produce un fluido nemático entre  $\sim 20\text{ }^{\circ}\text{C}$  y  $47\text{ }^{\circ}\text{C}$ , lo que la hace muy cómoda para la experimentación) y por este motivo reciben el nombre de “nematógenas”. En general, toda una clase de moléculas que satisfacen el patrón de la figura 1.1c (dos anillos aromáticos para-sustituídos, rígidamente unidos por una doble o triple enlace A—B dan lugar a mesofases.

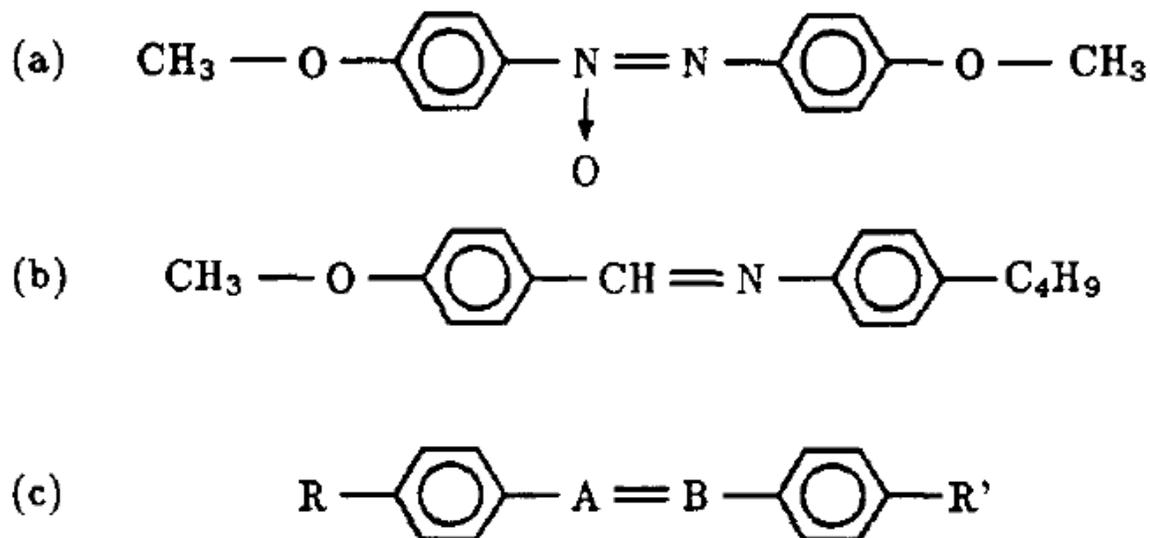


Figura 1.1: Ejemplos de moléculas orgánicas que dan lugar a una fase nemática: (a) p-azoxianisol (PAA), (b) p-metoxibencilideno p-n.butilanilina (MBBA) y (c) estructura general de una clase de nematógenos.

Otro tipo muy estudiado de moléculas que dan lugar a CL son los ésteres del colesterol (ver figura 1.2), aunque el propio colesterol, con un H en lugar de R—CO— no origina mesofases. El hecho de que los anillos en este caso no sean aromáticos hace que la estructura de la molécula no sea plana, así que su aspecto es el de un cuerpo rígido en forma de varilla con la cadena saturada C y el radical R colgando como colas flexibles de sus dos extremos.

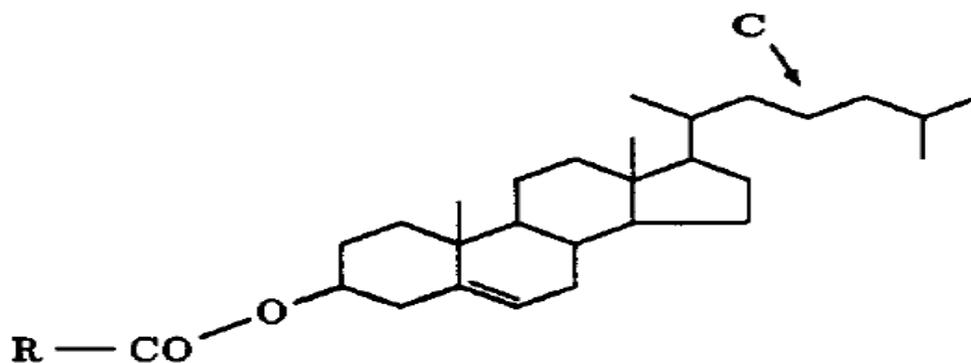


Figura 1.2: Fórmula general de los ésteres del colesterol (C es una cadena saturada y **R** el radical que define el éster).

Por último, hay que destacar otro tipo de moléculas completamente distintas, cuya forma no es alargada sino esencialmente plana, parecida a un disco. Hasta finales de los años 70 del siglo XX toda la evidencia experimental acumulada parecía indicar que las moléculas debían ser alargadas para generar mesofases. Fue entonces cuando se descubrió que también moléculas con forma de disco podían dar lugar a fluidos nemáticos (que reciben el nombre de nemáticos discóticos) e incluso originaban nuevos tipos de mesofases. Algunos ejemplos de estas moléculas son los hexa-*n*-alcanoatos de benceno, los hexa-*n*-alcanoatos de trifeníleno y los hexa-*n*-alcanoxitrifenílenos (ver figura 1.3).

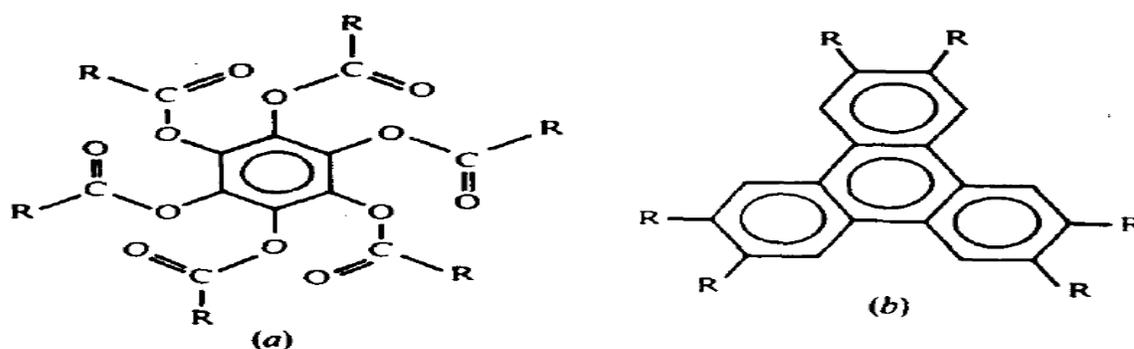


Figura 1.3: Dos ejemplos de estructuras moleculares que originan una fase nemática discótica: (a) hexa-*n*-alcanoatos de benceno y (b) hexa-*n*-alcanoatos de trifeníleno y hexa-*n*-alcanoxitrifenílenos .

En todos los ejemplos de CL mencionados hasta el momento la forma más simple de inducir las transiciones de fase es variando la temperatura. Por este motivo estos CL reciben el nombre genérico de **termotrópicos**.

En el segundo grupo de componentes fundamentales encontramos un gran número de polipéptidos sintéticos, los cuales adoptan la configuración de varillas de longitud  $\sim 300 \text{ \AA}$  y anchura  $20 \text{ \AA}$  cuando son disueltos en determinados disolventes. Si la concentración de estas estructuras es suficientemente grande estos sistemas originan mesofases. También a este grupo pertenecen las cadenas de ácido desoxirribonucleico (ADN) y ciertos virus, de entre los cuales el ejemplo clásico es el virus del mosaico del tabaco (longitud  $3000 \text{ \AA}$ , anchura  $200 \text{ \AA}$ ). Por último, las estructuras más grandes se consiguen en suspensiones de fibras de vidrio o plástico (longitud  $100 \mu\text{m}$ , grosor  $100 \mu\text{m}$ ) en algún líquido. En todos estos sistemas las variaciones de temperatura pueden producir alteraciones serias, llegando incluso a destruirlos; por ello, en lugar de la temperatura, el parámetro que permite controlar las transiciones es la concentración de varillas. Estos CL reciben el nombre genérico de **liotrópicos**.

El último grupo de componentes fundamentales es el de las estructuras asociadas. Tales estructuras se encuentran, por ejemplo, en el agua con jabón. En ellas aparece el anión alifático  $\text{CH}_3 - [\text{CH}_2]_{n-2} - \text{CO}_2^-$  ( $12 \leq n \leq 20$ ) con un catión del tipo  $\text{Na}^+, \text{K}^+, \text{NH}_4^+$ , etc. La cabeza polar del ácido (el grupo  $-\text{CO}^-$ ) se asocia con las moléculas de agua, mientras que la cadena alifática apolar huye de ellas (los materiales que presentan este comportamiento ambivalente reciben por ello el nombre de compuestos **anfifílicos**). Una única molécula no puede, obviamente, satisfacer ambas tendencias, pero sí puede hacerlo un grupo de ellas. Son estos agregados de moléculas los que pueden originar comportamiento mesomórfico cuando adquieren formas alargadas o planas. Estos sistemas son claramente liotrópicos. Otro ejemplo de cadenas anfifílicas que originan el mismo tipo de geometrías son los bloques copoliméricos. Estos sistemas, sin embargo, pueden ser termotrópicos.

### 1.3 Clasificación de las fases

La primera clasificación de las mesofases la hizo Friedel, introduciendo en ella la terminología básica que actualmente se utiliza. Según él, los CL

pueden agruparse en tres clases: nemáticos, colestéricos y esmécticos. En la actualidad se han catalogado catorce fases esmécticas diferentes, se ha probado la existencia de las llamadas fases nemáticas biaxiales y se han descubierto nuevos tipos de mesofases, como la fase columnar y las fases azules. En lo que sigue vamos a comentar las características principales de las mesofases conocidas.

### 1.3.1 Fase nemática

La palabra “nemático” viene del griego  $\nu\eta\mu\alpha$ , que significa hilo. El nombre alude a la estructura en forma de hilo de ciertos defectos (líneas de disclinación) observados en los materiales nemáticos. En la fase nemática, los centros de gravedad de las moléculas carecen de cualquier tipo de ordenación (no hay picos de Bragg en los espectros de rayos X). Las correlaciones entre las posiciones de las moléculas son similares a las de un líquido convencional y, de hecho, un nemático fluye igual que un líquido. Sin embargo, sí hay una ordenación macroscópica en las orientaciones de las moléculas, que tienden a alinearse en torno a un eje común arbitrario, descrito por la dirección del vector unitario  $\hat{n}$ , conocido como **director**. Todas las propiedades tensoriales de un nemático están afectadas por este hecho. Así por ejemplo, una de las propiedades que más caracteriza a los nemáticos es la existencia de un eje óptico en la dirección de  $\hat{n}$ , (birrefringencia), con una diferencia entre índices de refracción medidos con polarizaciones paralela y normal a  $\hat{n}$ , bastante apreciable (una diferencia típica es de 0.2, para el PAA). Por lo demás, los nemáticos poseen perfecta simetría rotacional en torno a  $\hat{n}$ ; además, tienen simetría cuadrupolar en la dirección  $\hat{n}$ , es decir, los estados de director  $\hat{n}$ , y  $-\hat{n}$ , son indistinguibles (si las moléculas son dipolares esto implica que la fase nemática es paramagnética).

Los fluidos nemáticos dispersan intensamente la luz visible, debido a fluctuaciones de larga longitud de onda del director. La distancia media que un fotón puede recorrer en un nemático sin ser dispersado es  $\sim 1\text{mm}$ , por lo que los nemáticos muestran una apariencia turbia.

La fase nemática sólo se presenta en materiales aquirales (que no distinguen entre derecha e izquierda), bien porque sus moléculas lo son, bien porque el sistema es una mezcla de moléculas dextrógiras y levógiras. Estas moléculas

pueden ser tanto de forma alargada (PAA, MBBA, etc.) como planas, con forma de disco. Sin embargo, hay una distinción importante entre ambas: en el primer caso el eje molecular tiende a estar paralelo al director  $\hat{n}$ , mientras que en el segundo es el eje perpendicular al plano molecular el que tiende a alinearse con  $\hat{n}$ ; esto se refleja macroscópicamente en el signo de la birrefringencia (o equivalentemente del parámetro de orden), positivo en el primer caso y negativo en el segundo. Un esquema de la fase nemática aparece en la figura 1.4.

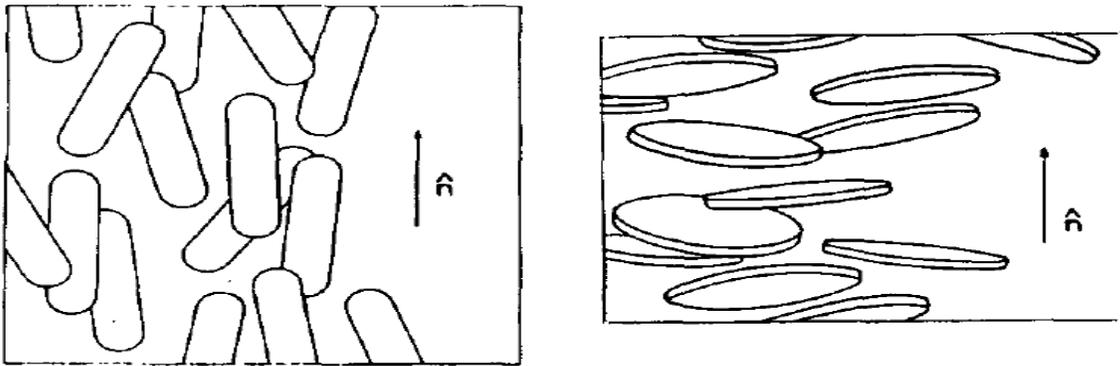


Figura 1.4: Aspecto microscópico de las fases nemáticas de moléculas (a) alargadas o (b) planas.

### 1.3.2 Fase colestérica

La fase colestérica es localmente igual a la nemática, esto es, los centros de masa de las moléculas están completamente desordenados, mientras que sus orientaciones se concentran preferentemente en torno a un eje marcado por un director  $\hat{n}$ . Sin embargo, en esta fase  $\hat{n}$  no es constante en el espacio, como ocurre en la fase nemática; sino que adopta una configuración helicoidal (ver figura 1.5). Así, si tomamos el eje helicoidal paralelo al eje Z, el director queda parametrizado de la forma:

$$\begin{aligned} n_x &= \cos q_0(z - z_0) \\ n_y &= \sin q_0(z - z_0) \\ n_z &= 0 \end{aligned}$$

Tanto el eje helicoidal como  $z_0$  son arbitrarios, como ocurría en la fase nemática con la dirección del director y como ocurre siempre que un grupo continuo de simetrías se rompe espontáneamente. Debido a la equivalencia de los estados  $\hat{n}$  y  $-\hat{n}$  el sistema es periódico con periodo igual a la mitad del paso de la hélice, esto es  $L = \pi/|q_0|$ . Cabe aclarar que se le llama paso de la hélice a la distancia que necesitamos recorrer para encontrar la misma orientación entre dos vectores  $\hat{n}$  sin que entre ellos exista otro que comparta la misma orientación (ver figura 1.5).  $L$  es siempre mucho mayor que las dimensiones moleculares (típicamente 3000 Å) y comparable a las longitudes de onda ópticas, lo que produce dispersión Bragg de los haces de luz. En todas las restantes propiedades la fase colestérica es similar a la nemática, por lo que ésta última puede considerarse un caso particular de fase colestérica, con  $q_0 = 0$ .

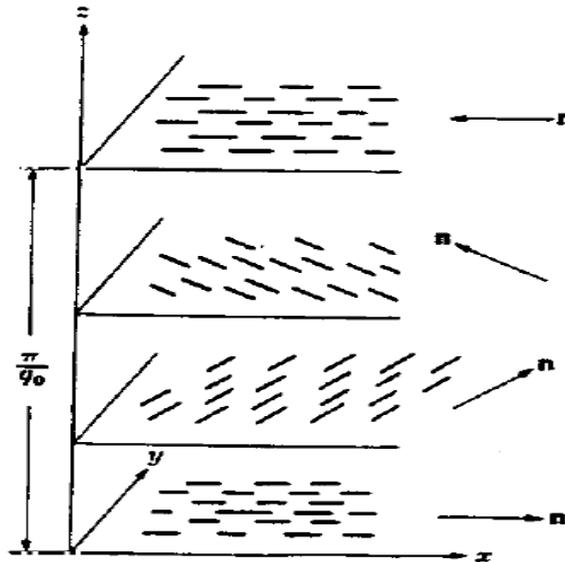


Figura 1.5: Esquema de una fase colestérica.

Encontramos fases colestéricas solamente en sistemas esencialmente quirales, bien constituidos por moléculas quirales, bien formados por mezclas no racémicas. Esto se traduce en que el signo de  $q_0$  no es arbitrario, sino que depende de la quiralidad del sistema; así, podemos encontrar materiales colestéricos con la hélice a izquierdas o a derechas (siempre en el mismo sentido y a la misma temperatura). Ejemplos típicos de materiales colestéricos son los ésteres del colesterol (figura 1.2), de los que esta mesofase recibe su nombre.

### 1.3.3 Fases esmécticas

El término esméctico, procedente del griego  $\sigma\mu\eta\gamma\mu\alpha$ , que significa jabón, fue acuñado por Friedel para denotar ciertas mesofases cuyas propiedades estructurales recordaban las de los jabones. Básicamente las fases esmécticas se caracterizan por poseer una estructura de capas con un espaciado muy bien definido, de modo que puede observarse un pico muy acusado en los espectros de difracción de rayos X. Así pues, las fases esmécticas son más ordenadas que las fases nemática y colestérica porque, además de la ordenación orientacional de los constituyentes del sistema, presentan un grado intermedio de orden posicional.

Aunque Friedel reconoció una única fase esméctica, enseguida empezó a verse que había varias fases diferentes que poseían la misma propiedad estructural de formar capas. Se las empezó a clasificar añadiendo una letra al nombre de esméctico. Hoy día hay identificadas catorce fases esmécticas y nada permite suponer que la lista se vaya a cerrar ahí. De entre todas ellas, las tres más importantes son denotadas con las letras A, B y C.

#### Esméctica A

Esta fase presenta una estructura en capas de un grosor similar a la longitud de los constituyentes (ver figura 1.6). Los centros de gravedad de las moléculas de cada capa se distribuyen sin ningún orden posicional; además, la correlación entre capas es despreciable, por lo que cada capa puede ser considerada un líquido bidimensional. Por otra parte, las moléculas están orientadas en torno a la dirección perpendicular al plano de la capa (eje Z), de modo que el sistema es ópticamente uniaxial, siendo el eje óptico el normal a las capas. La simetría de la fase queda completamente definida añadiendo que las direcciones  $+z$  y  $-z$  son equivalentes.

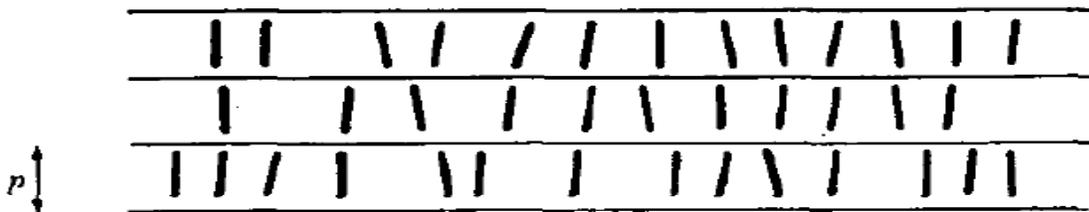


Figura 1.6: Esquema de una fase esméctica A.

## Esméctica C

La única diferencia entre esta fase y la anterior es que el eje en torno al cual se orientan las moléculas no es el normal a las capas, sino que forma con él un ángulo  $\theta$  (ver figura 1.7). De este hecho resulta un espaciado entre las capas  $d = l \cos \theta$ , siendo  $l$  la longitud de los constituyentes. Esta fase es, pues, ópticamente biaxial.

La existencia de la fase esméctica C requiere que los constituyentes del sistema sean ópticamente inactivos o que se trate de una mezcla racémica. Si no es así, en lugar de esta fase se obtiene una equivalente en la que el vector director de la orientación molecular  $\hat{n}$  precesa en torno al eje normal a las capas, dotando a la fase de una estructura helicoidal cuyo paso de hélice,  $p$ , es mucho mayor que el espaciado entre las capas (típicamente,  $p/d \sim 10^3$ ). Esta fase recibe el nombre de fase esméctica C\*.

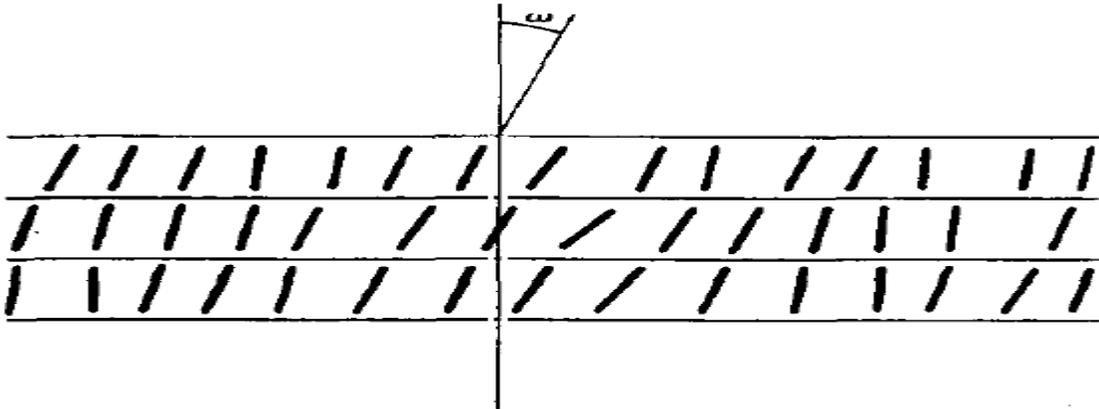


Figura 1.7: Esquema de una fase esméctica C.

## Esméctica B

Lo que diferencia esta fase de las dos anteriores es la ordenación posicional dentro de las capas. Tanto el esméctico A como el C (o el C\*) consisten de un apilamiento de capas líquidas bidimensionales; en el esméctico B las capas están formadas por sólidos bidimensionales con estructura de red triangular o bien por otro tipo de fase bidimensional, entre el líquido y el sólido, llamada fase hexática. Esta fase se caracteriza porque la correlación entre posiciones

de las moléculas en el plano es de corto alcance, mientras que la orientación de los vectores de la red es constante a lo largo del sistema. Por este motivo, el tipo de orden que exhibe esta fase se denomina orden orientacional de enlaces.

La existencia teórica de la fase hexática es una consecuencia de la teoría de Kosterlitz-Thouless aplicada a la transición sólido-líquido en 2D. La teoría predice una transición continua mediada por la disociación de pares de dislocaciones. Halperin, Nelson y Young, elaboraron los detalles de esta teoría y predijeron la existencia de la fase hexática entre el sólido y el líquido. Birgeneau y Litster sugirieron la posibilidad de encontrar un cristal líquido 3D formado por capas hexáticas 2D cuya interacción diera lugar a una ordenación orientacional de enlaces 3D de largo alcance. La existencia de esta fase quedó establecida inequívocamente tras los experimentos de difracción de rayos X de Pindak. Esta fase recibe actualmente el nombre de fase hexática B para diferenciarla de la fase esméctica formada por capas de cristales 2D, también denominada cristal B. La fase hexática B aparece entre la esméctica A y alguna fase líquido-cristalina con orden posicional en las tres dimensiones (como por ejemplo, la fase cristal B).

### Esmécticos “exóticos”

El rango de fases esmécticas que no se clasifican en los tres grupos anteriores va desde la D a la K (incluyendo algunas variedades “estrella”). En conjunto reciben el nombre genérico de esmécticos exóticos. Algunas de estas fases parecen ser auténticos cristales con orden 3D de largo alcance, y por lo tanto no pertenecen al ámbito de las mesofases. La mayoría, sin embargo, constituyen variedades de la fase esméctica B que incluyen la inclinación del director de las capas con respecto a la normal (y en algunos casos su precesión) y posibles distorsiones de la red cristalina hexagonal.

# Capítulo 2

## Termodinámica

### 2.1 Primera ley de la termodinámica y Equilibrio

La primera ley se refiere a la energía interna. La cantidad, a la cual damos el símbolo  $E$ , es definida como la energía total del sistema. Postulamos que esto obedece dos propiedades. La energía interna es extensiva. Esto quiere decir que si  $E_1$  y  $E_2$  son las energías respectivas de dos sistemas físicos, la energía  $E$  del sistema compuesto por ambos es la suma:

$$E = E_1 + E_2 \quad (1)$$

Debido a esta aditividad, propiedades extensas dependen directamente del tamaño del sistema. En otras palabras, si doblamos el tamaño del sistema que mantiene otras cosas fijas, la energía del sistema se duplicará.

La propiedad fundamental del segundo postulado es la afirmación de que la cantidad total de energía en cualquier sistema aislado (sin interacción con ningún otro sistema) permanece invariable con el tiempo. Esto quiere decir que si la energía de un sistema cambia, debe ser como consecuencia de influir sobre el sistema, es decir, que se permite el flujo de alguna forma de energía hacia o a partir del sistema. Una cosa que podemos hacer es realizar trabajo mecánico. Empíricamente sabemos que la energía de un sistema puede ser cambiada si se hace trabajo sobre el sistema, o si se permite el flujo de calor hacia el sistema. Por lo tanto, escribimos como una definición de calor:

$$dE = \delta Q + \delta W \quad (2)$$

Esta es conocida generalmente como la primera ley. La  $\delta W$  es la diferencial de trabajo realizado por el sistema (manipulando las limitaciones mecánicas), y  $\delta Q$  es el diferencial del flujo de calor del sistema. Estamos denotando con  $\delta$

al diferencial inexacto, esto es que depende del camino por el cual se realizó el proceso. El término del trabajo se puede escribir en forma general de la forma

$$dW = \mathbf{f} \cdot d\mathbf{X} \quad (3)$$

donde  $\mathbf{f}$  es "la fuerza" aplicada, y  $\mathbf{X}$  representa una variable mecánica extensiva. Un ejemplo familiar es

$$dW = -pdV \quad (4)$$

Donde  $V$  es el volumen global del sistema, y  $p$  es la presión externa ejercida sobre nuestro sistema. Otro ejemplo

$$dW = fdL \quad (5)$$

Donde  $f$  es la tensión aplicada a una banda elástica y  $L$  es la longitud de aquella banda. En general, hay muchas variables mecánicas extensivas, y sus cambios implican trabajo. La notación vectorial abreviada,  $\mathbf{f} \cdot d\mathbf{X}$ , es usada para indicar todos los términos de trabajo asociados al sistema,  $f_1 dX_1 + f_2 dX_2 + \dots$ .

La definición de calor estará completa solamente si postulamos una forma de controlar su transferencia de un sistema físico a otro. Para eso damos la definición siguiente: se llama paredes adiabáticas a las que prohíben el paso de calor de un sistema a otro. Así, cuando un sistema pasa de un estado  $A$  con energía  $E_A$ , a otro estado  $B$  con energía  $E_B$ , lo hace mediante un proceso mecánico en el que las paredes adiabáticas impiden cualquier otra forma de transferencia de energía distinta a la del trabajo mecánico. Entonces el cambio en la energía del sistema físico será  $E_A - E_B$ . En cambio, si el mismo proceso se realiza cuando ha sido retirada al menos una de las paredes adiabáticas, y sucede que el cambio de energía ya no es  $E_A - E_B$ , habrá que reconocer que está presente otra clase de transferencia de energía distinta. Esa diferencia es la que llamamos calor. De ser así, hay que reconocer, además, que el proceso ya no es puramente mecánico.

En esta observación sobre la medición de la energía, asumimos que hay un medio experimental para caracterizar "el estado" de un sistema.

Experimentalmente sabemos que los sistemas aislados tienden a evolucionar espontáneamente hacia estados simples terminales. Llamaremos estados de equilibrio a estos estados. Por "simple" significamos que macroscópicamente puede ser caracterizado por un pequeño número de variables. En particular, el estado de equilibrio de un sistema está completamente caracterizado macroscópicamente especificando las variables  $E$  y  $X$ . Para un sistema en el cual las variables mecánicas relevantes extensivas son el volumen y los números de moléculas, las variables que caracterizan el sistema son

$$E, V, n_1, \dots, n_j, \dots, n_r \quad (6)$$

Donde  $E$  es la energía,  $V$  el volumen,  $n_j$  número de moles de la especie  $j$ , y  $n_r$  el subíndice  $r$  se refiere a las componentes.

Si un campo eléctrico es aplicado, el dipolo total del sistema debe ser añadido a la lista de variables relevantes.

A propósito, en un desarrollo completamente deductivo de la termodinámica macroscópica, habría que distinguir entre variables de composición  $n_1, n_2, \dots, n_r$ , el número de moles y las variables mecánicas extensivas como el volumen,  $V$ . Esta observación puede ser usada para verificar que las variables de composición juegan un papel matemáticamente equivalente a las variables mecánicas estándar extensivas.

La lista completa de variables relevantes es a veces una cuestión difícil a nivel experimental. Pero independiente de la lista, el rasgo más importante del estado de equilibrio macroscópico es que es caracterizado por un pequeño número de variables, pequeño comparado al número de grados de libertad mecánicos que son necesarios para describir en general un estado de no equilibrio arbitrario de un sistema macroscópico de muchas partículas.

Prácticamente ningún sistema de interés físico es rigurosamente un estado en equilibrio. Sin embargo, muchos están en equilibrio metaestable, que por lo general puede ser tratado con la termodinámica de estados en equilibrio. Si en el transcurso de la observación del sistema, aparece que el sistema es independiente del tiempo, independiente de su historia, y no hay ningún flujo de energía o materia, entonces el sistema puede ser tratado como uno que se

encuentra en equilibrio, y las propiedades del sistema pueden ser caracterizadas solo por las variables  $E, V, n_1, \dots, n_r$ .

## 2.2 Segunda ley de la termodinámica

Postulado de la segunda ley de la termodinámica, que establece lo siguiente:

Existe una función de estado extensiva,  $S(E, \mathbf{X})$ , la cual es monótona creciente de  $E$ , y si el estado B es realizado adiabáticamente desde el estado A, entonces  $S_B \geq S_A$ .

Note que si el estado B es reversible y llevado al estado A, entonces el proceso  $B \rightarrow A$  podrá ser realizado también adiabáticamente. En este caso, el postulado implica que  $S_A \geq S_B$ . De ahí, si dos estados, A y B, son accesibles a un proceso adiabático reversible, entonces  $S_A = S_B$ . En otras palabras, el cambio en el sistema es entonces  $\Delta S = S_B - S_A = 0$  es cero para un proceso reversible adiabático, y en otro caso  $\Delta S$  es positivo para cualquier proceso adiabático naturalmente irreversible. Es decir

$$(\Delta S)_{\text{adiabático}} \geq 0 \tag{7}$$

donde la igualdad se tiene sólo para cambios reversibles.

Las palabras "reversible" e "irreversible" merecen un comentario. Un proceso reversible es aquel que exactamente puede ser restablecido por cambios infinitesimales en las variables de control. Como tal, esto es un proceso termodinámico cuasi estático realizado arbitrariamente bastante despacio de modo que en cada etapa el sistema esté en equilibrio. En otras palabras, un proceso reversible progresa dentro de múltiples estados de equilibrio. Estos estados simplemente son caracterizados por unas variables, cualquiera de estos procesos puede ser invertido controlando aquellas variables; de ahí el nombre "reversible". Otros procesos naturales, por otra parte, requieren múltiples cambios de estado no-equilibrio infinitamente más complejo, en general, el registro de un enorme número de variables para caracterizar estos estados. Sin controlar todas estas variables, es sumamente improbable que en una tentativa de invertir tal proceso, uno observara al sistema pasar por los

mismos puntos en el espacio de estados. De ahí, que el proceso es "irreversible". La función extensiva de estado,  $S(E, \mathbf{X})$ , se llama Entropía.

La entropía obedece también otras propiedades importantes. Para encontrarlas, consideremos su forma diferencial

$$dS = \left(\frac{\partial S}{\partial E}\right)_{\mathbf{X}} dE + \left(\frac{\partial S}{\partial \mathbf{X}}\right)_{\mathbf{E}} \cdot d\mathbf{X} \quad (8)$$

donde el segundo término es una abreviatura para  $(\partial S/\partial X_1)dX_1 + (\partial S/\partial X_2) dX_2 + \dots$ . Para un proceso reversible, también tenemos

$$dE = (\delta Q)_{\text{rev}} + \mathbf{f} \cdot d\mathbf{X} \quad (9)$$

Aquí, debido a la reversibilidad, "la fuerza",  $\mathbf{f}$ , es una característica del sistema. Por ejemplo, en el equilibrio, las presiones aplicadas por fuera,  $p_{\text{ext}}$ , son las mismas que la presión del sistema,  $p$ .

La combinación de las dos últimas ecuaciones da

$$dS = \left(\frac{\partial S}{\partial E}\right)_{\mathbf{X}} (\delta Q)_{\text{rev}} + \left[\left(\frac{\partial S}{\partial \mathbf{X}}\right)_{\mathbf{E}} + \left(\frac{\partial S}{\partial E}\right)_{\mathbf{X}} \mathbf{f}\right] \cdot d\mathbf{X} \quad (10)$$

Para un proceso adiabático reversible se cumple que tanto  $dS$  como  $(\delta Q)_{\text{rev}}$  son cero. Ya que la última ecuación debe cumplirse para todos los procesos reversibles, esto debe contener a los procesos reversibles adiabáticos. Para asegurar este comportamiento, el término en corchetes en la última ecuación debe ser idéntico a cero. De ahí

$$\left(\frac{\partial S}{\partial \mathbf{X}}\right)_{\mathbf{E}} = -\left(\frac{\partial S}{\partial E}\right)_{\mathbf{X}} \mathbf{f} \quad (11)$$

Todas las cantidades implicadas en esta ecuación son las funciones de estado. Por lo tanto, la igualdad se verifica para procesos no adiabáticos así como adiabáticos.

Se postula que  $S$  es una función monótona creciente de  $E$ ; es decir  $(\partial S/\partial E)_{\mathbf{X}} > 0$ , o  $(\partial E/\partial S)_{\mathbf{X}} \geq 0$ . Este último término se define como la temperatura,  $T$ . Es decir

$$T \equiv \left(\frac{\partial E}{\partial S}\right)_{\mathbf{X}} \geq 0 \quad (12)$$

Tanto  $E$  como  $S$  son variables extensivas, la temperatura es intensiva. Es decir  $T$  es independiente del tamaño del sistema.

Las dos últimas ecuaciones se combinan para obtener

$$(\partial S / \partial \mathbf{X})_E = -\mathbf{f} / T \quad (13)$$

Por lo tanto, considerando  $dS = (\partial S / \partial E)_X dE + (\partial S / \partial \mathbf{X})_E \cdot d\mathbf{X}$ , tenemos

$$dS = \left(\frac{1}{T}\right) dE - \left(\frac{\mathbf{f}}{T}\right) \cdot d\mathbf{X} \quad (14)$$

o bien

$$dE = TdS + \mathbf{f} \cdot d\mathbf{X} \quad (15)$$

Según esta última ecuación, la energía para estados en equilibrio es caracterizada por  $S$  y  $\mathbf{X}$ , es decir

$$E = E(S, \mathbf{X}) \quad (16)$$

Las ecuaciones presentadas en esta sección son las relaciones fundamentales que constituyen la afirmación matemática de la segunda ley de la termodinámica.

## 2.3 Transformaciones de Legendre y Funciones Auxiliares

La simplicidad con la cual se pueden realizar los análisis es mejor si se introducen ciertos conceptos matemáticos y métodos.

Uno de estos métodos es el procedimiento de las transformaciones de Legendre. Para ver por qué este método es útil, vamos a utilizar la forma apropiada del diferencial de trabajo reversible. En este caso, para desplazamientos reversibles

$$\mathbf{f} \cdot d\mathbf{X} = -pdV + \sum_{i=1}^r \mu_i dn_i \quad (17)$$

donde  $p$  es la presión del sistema,  $V$  es el volumen del sistema,  $n_i$  es el número de moles de especie  $i$  (de los cuales hay  $r$  especies), y  $\mu_i$  es el potencial químico de la especie  $i$ . El potencial químico es definido por la ecuación anterior. Expresa la razón de cambio reversible de la energía interna provocado por el cambio en el número de moles  $n_i$  manteniendo los otros números de moles a  $S$  y  $V$ , constantes. El potencial químico es la propiedad intensiva que controla la masa o el equilibrio de partículas tal como la temperatura controla el equilibrio térmico. Los gradientes de los potenciales químicos inducirán el flujo de masa o cambios de átomos y moléculas, y la ausencia de tales gradientes asegura el equilibrio de la materia en el sistema. Los procesos de flujo de átomos y moléculas del sistema con el ambiente son por los cuales el equilibrio entre las fases diferentes de materia y entre las diferentes especies químicas es establecido.

En vista de la forma para  $\mathbf{f} \cdot d\mathbf{X}$ , tenemos

$$dE = TdS - pdV + \sum_{i=1}^r \mu_i dn_i \quad (18)$$

Así,  $E = E(S, V, n_1, \dots, n_r)$  es función natural de  $S$ ,  $V$  y las  $n_i$ . Por consiguiente, los principios variacionales  $(\Delta E)_{S,V,n} > 0$  y  $(\delta E)_{S,V,n} \geq 0$  nos dicen los hechos sobre los estados de equilibrio caracterizados por  $S$ ,  $V$ , y las  $n_i$ . Se utiliza la transformación de Legendre para utilizar variables de estado que no sean  $E$ ,  $V$  y  $n$  o  $S$ ,  $V$  y  $n$  las cuales sean mas fáciles de manejar en el experimento para caracterizar los estados de equilibrio. Veamos el siguiente caso:

Supongamos  $f = f(x_1, \dots, x_n)$  es una función natural de  $x_1, \dots, x_n$ . Entonces

$$df = \sum_{i=1}^n u_i dx_i, \quad u_i = (\partial f / \partial x_i)_{x_j} \quad (19)$$

Definimos

$$g = f - \sum_{i=r+1}^n u_i x_i \quad (20)$$

Claramente

$$\begin{aligned}
dg &= df - \sum_{i=r+1}^n [u_i dx_i + x_i du_i] \\
&= \sum_{i=1}^n u_i dx_i - \sum_{i=r+1}^n u_i dx_i - \sum_{i=r+1}^n x_i du_i \\
&= \sum_{i=1}^r u_i dx_i + \sum_{i=r+1}^n (-x_i) du_i
\end{aligned}$$

Así,  $g = g(x_1, \dots, x_r, u_{r+1}, \dots, u_n)$  es una función natural de  $x_1, \dots, x_r$  y las variables conjugadas a  $x_{r+1}, \dots, x_n$ , a saber,  $u_{r+1}, \dots, u_n$ . La función  $g$  es llamada la transformación de Legendre de la función  $f$ . Esto transforma la dependencia sobre  $x_{r+1}, \dots, x_n$ , a una dependencia sobre  $u_{r+1}, \dots, u_n$ . Entonces resulta que este tipo de construcción proporciona un esquema para introducir una función natural de  $T$ ,  $V$ , y  $n$  ya que  $T$  es simplemente la variable conjugada de  $S$ . Pero para el esquema de proporcionar una solución satisfactoria, la transformación de Legendre,  $g = g(x_1, \dots, x_r, u_{r+1}, \dots, u_n)$ , no debe contener mas información que  $f = f(x_1, \dots, x_n)$ . Esta equivalencia se establece notando que siempre nos podemos regresar a la función  $f$  original  $f = f(x_1, \dots, x_n)$ . Geométricamente, esta observación corresponde al hecho que dentro de una constante, una función equivalentemente puede ser representada sobre una familia de líneas tangentes o por el lugar de puntos que satisfacen  $f = f(x_1, \dots, x_n)$ .

Para construir una función que tenga como variables naturales a  $T$ ,  $V$ , y  $n$ , se procede como sigue:

$$F = E - TS = F(T, V, n) \quad (21)$$

Esta función se llama la energía libre de Helmholtz. Claramente

$$dF = -SdT - pdV + \sum_{i=1}^r \mu_i dn_i \quad (22)$$

La transformación de Legendre nos permite cambiar una variable termodinámica por su variable conjugada. Los cambios entre pares no conjugados no son posibles en este enfoque.

Otra posible transformación de Legendre que especifique el estado de equilibrio de un sistema es

$$\begin{aligned} G &= E - TS - (-pV) \\ &= E - TS + pV = G(T, p, n) \end{aligned}$$

y

$$\begin{aligned} H &= E - (-pV) = E + pV \\ &= H(S, p, n) \end{aligned}$$

que se llaman la energía libre de Gibbs y la entalpía, respectivamente. Sus cálculos diferenciales son

$$dG = -SdT + Vdp + \sum_{i=1}^r \mu_i dn_i \quad (23)$$

$$dH = TdS + Vdp + \sum_{i=1}^r \mu_i dn_i \quad (24)$$

## 2.4 Relaciones de Maxwell

Una vez que se dispone de las funciones auxiliares, hay muchas variables que pueden ser relacionadas. Por ejemplo se puede considerar

$$\left(\frac{\partial S}{\partial V}\right)_{T,n} \quad (25)$$

En la cual vemos a S como función de v, T, n.

Para analizar esta expresión, nos fijamos en la siguiente diferencial que tiene como funciones naturales a T, V, y n:

$$dF = -SdT - pdV + \mu dn$$

Nótese que si  $df = adx + bdy$ , entonces  $(\partial a/\partial y)_x = (\partial b/\partial x)_y$ . Por consiguiente, la forma diferencial para  $F$  implica

$$(\partial S/\partial V)_{T,n} = (\partial p/\partial T)_{V,n} \quad (26)$$

que es una de las relaciones de Maxwell.

Como otro ejemplo, considere  $(\partial S/\partial p)_{T,n}$ , en la cual se ve a  $S$  como función de  $p, T, y n$ . la forma diferencial para  $G$

$$dG = -SdT + Vdp + \mu dn$$

Otra vez, si  $adx + bdy$  es una diferencial exacta, entonces  $(\partial a/\partial y)_x = (\partial b/\partial x)_y$ ; por consiguiente, el diferencial de  $G$  implica la relacion

$$(\partial S/\partial p)_{T,n} = (\partial V/\partial T)_{p,n} \quad (27)$$

que es otra de las relaciones de Maxwell.

# Capítulo 3

## Teoría de la elasticidad

### 3.1 Cinemática

En este trabajo abordaremos a los cristales líquidos como cuerpos elásticos. Se entiende por un cuerpo elástico a aquél que tiene la propiedad de regresar a su forma original después de sufrir una fuerza externa, que en este contexto se llaman esfuerzos. La característica principal del régimen elástico es que se establecen relaciones lineales entre los esfuerzos aplicados y las deformaciones observadas, que aquí llamaremos desplazamientos. Esta relación lineal resulta válida para ciertos valores de los esfuerzos y de las deformaciones.

Esta relación lineal involucra ciertas constantes, que reciben el nombre de módulos de elasticidad. Entre estos se pueden mencionar, por ejemplo, el módulo de Young, el de rigidez y el módulo de bulto.

También están el cociente de Poisson, el primer parámetro de Lamé y el módulo de ondas P, entre otros ejemplos.

En general, los desplazamientos y los esfuerzos se pueden expresar mediante vectores y el conjunto de constantes (o módulos) mediante una matriz. En esta sección utilizaremos el convenio de suma de Einstein, en el cual se eliminan los símbolos de sumatoria y entendiendo que los índices repetidos en la expresión resultante indican suma sobre todos los posibles valores del índice.

### Tensor de deformaciones

Los sistemas materiales en general sufren desplazamientos. Debemos distinguir por lo tanto entre un desplazamiento sin deformación de otro en el que además se pueda producir una alteración del sistema, que denominaremos deformación. Se dice que un medio continuo sufre deformaciones si las distancias relativas entre puntos cambian a lo largo del tiempo.

Si consideramos un punto del sistema que en el instante  $t = 0$  se encuentra en el punto de coordenadas  $(X_1, X_2, X_3)$  y que en el instante  $t$  se halla en  $(x_1, x_2, x_3)$  que de acuerdo con la dinámica del sistema se puede expresar en términos del punto anterior mediante  $x_i = f_i(X, t)$ , entonces un punto que distaba  $dX_i$  del  $X$  distará  $dx_i$  del  $x$  dado por

$$dx_i = \frac{\partial f_i}{\partial X_j}(X, t)dX_j \quad (28)$$

Esta diferenciación se realiza a  $t$  constante y en el instante  $t$ . A la matriz  $F_{ij} = \partial f_i / \partial X_j$  se le da el nombre de gradiente de la deformación en el punto  $X$  y en el instante  $t$ . Análogamente, si tenemos otro punto próximo al  $X$  que dista  $\delta X_i$  entonces distará del  $x$  en el instante  $t$  un valor  $\delta x_i$  dado por

$$\delta x_i = F_{ij}(X, t)\delta X_j \quad (29)$$

Para determinar la deformación no basta con medir las diferencias entre las componentes  $dX_i$  y  $dx_i$  pues en general una rotación las modifica. Una posibilidad es comparar los módulos  $|dX|$  y  $|dx|$ , pero en este caso una rotación del sistema material tampoco los alteraría. Por eso se define la deformación estudiando la variación del producto escalar entre dos elementos arbitrarios

$$d\mathbf{x} \cdot \delta\mathbf{x} - d\mathbf{X} \cdot \delta\mathbf{X} = dx_i \delta x_i - dX_k \delta X_k = F_{ij}dX_j F_{il}\delta X_l - dX_k \delta X_k$$

pero los últimos elementos los podemos poner

$$dX_k = \delta_{kj}dX_j, \quad \delta X_k = \delta_{kl}\delta X_l, \quad dX_k \delta X_k = \delta_{kj}dX_j \delta_{kl}\delta X_l = \delta_{jl}dX_j \delta X_l$$

Con lo que

$$(F_{ij}F_{il} - \delta_{jl})dX_j \delta X_l = 2R_{jl}dX_j \delta X_l \quad (30)$$

Al tensor  $C_{ij} = F_{ki}F_{kj}$  se le denomina **tensor de las dilataciones**, ya que establece en cada punto cómo se expresa  $d\mathbf{x} \cdot \delta\mathbf{x}$  en términos de  $d\mathbf{X} \cdot \delta\mathbf{X}$ . El tensor  $R_{ij} = (C_{ij} - \delta_{ij})/2$  recibe el nombre de tensor de deformaciones. Está

definido en cada punto del medio material y sirve para calcular alrededor de cada punto cómo han variado los diferentes productos escalares entre pares de vectores con origen en ese punto. Si todas sus componentes  $R_{ij}(X, t)$  son nulas en un punto, es que no ha habido deformación alrededor de ese punto.

**Teorema** La condición necesaria y suficiente para que no exista deformación en el punto  $X$  desde el instante inicial  $t = 0$  hasta el tiempo  $t$ , con respecto a la configuración inicial es que el tensor de deformaciones  $R_{ij}(X, t) = 0$ , en el punto  $X$ .

## Diagonalización del tensor de deformaciones

El tensor de dilataciones  $C_{ij} = C_{ji}$  es simétrico y definido positivo por lo que sus valores propios son reales positivos.

El tensor de deformaciones  $R_{ij} = R_{ji}$  es simétrico y posee los mismos vectores propios que el  $C_{ij}$  y sus valores propios  $R_j$  están ligados con los de éste  $C_j$  mediante  $R_j = (C_j - 1)/2 > -1/2$ .

Los valores propios  $R_j$ , en el caso de ser pequeños comparados con la unidad, representan la deformación relativa de los correspondientes elementos de longitud, pues a lo largo de la correspondiente dirección principal se tiene  $dx^2 - dX^2 = 2R_j dX^2$ , con lo que  $dx/dX = \sqrt{1 + 2R_j} \approx 1 + R_j + O(R_j^2)$ , y así  $dx \approx dx + R_j dX$ . Si inicialmente tenemos un elemento de volumen de lados  $dX$ ,  $dY$  y  $dZ$ , y después de la evolución se transforma en el elemento de lados  $dx$ ,  $dy$  y  $dz$ , el volumen del sistema se obtiene

$$\begin{aligned} dV' &= dx dy dz = (1 + R_1)(1 + R_2)(1 + R_3) dX dY dZ \\ &\approx (1 + R_1 + R_2 + R_3) dX dY dZ = (1 + R_{ii}) dV \end{aligned}$$

a primer orden en las deformaciones, ya que la traza de un tensor es invariante bajo los cambios de coordenadas. Despejando la traza  $R_{ii}$

$$R_{ii} = \frac{dV' - dV}{dV} \quad (31)$$

La traza del tensor de deformaciones nos mide la variación relativa del volumen del sistema en cada punto. Por eso un tensor de deformaciones de traza nula corresponde a una deformación sin cambio local de volumen.

Si un valor propio  $R_I < 0$ , entonces en la correspondiente dirección principal

$$dx = \sqrt{1 + 2R_I}dX < dX$$

y por lo tanto existe una contracción, en tanto que existe una dilatación si  $R_I > 0$ . Si el valor propio es nulo, entonces no existe modificación del elemento de arco que tiene esa dirección.

Si  $\mathbf{n}$  es un vector unidad, la magnitud

$$dx_N = \sqrt{2n_i R_{ij} n_j} dX$$

nos mide la deformación del elemento de arco  $d\mathbf{X} = \mathbf{n}dX$ . Efectivamente, si  $dx$  es el transformado del  $d\mathbf{X}$ , con  $dX_i = n_i dX$ , el cálculo de  $dx^2 - d\mathbf{X}^2 = 2R_{ij}dX_i dX_j = 2R_{ij}n_i n_j (dX)^2$ . Podemos pues interpretar que  $2R_{ij}n_j dX$  es el elemento deformado del  $n_j dX$ , que proyectado sobre sí mismo, nos da el valor de la deformación normal.

## Tensor de deformaciones linearizado

Si llamamos  $\mathbf{u} = \mathbf{x} - \mathbf{X}$  al desplazamiento sufrido por el punto  $X$ , resulta que

$$x_i = X_i + u_i(X, t)$$

y de aquí  $F_{ij} = \delta_{ij} + \partial u_i / \partial X_j$ , con lo que

$$R_{ij} = \frac{1}{2} \left( \frac{\partial u_i}{\partial X_j} + \frac{\partial u_j}{\partial X_i} \right) + \frac{1}{2} \frac{\partial u_k}{\partial X_i} \frac{\partial u_k}{\partial X_j} \quad (32)$$

que contiene una parte lineal en el desplazamiento y otra cuadrática. Si las variaciones de los desplazamientos  $|\partial u_i / \partial X_j| \ll 1$  son muy pequeñas entonces es buena la aproximación del tensor de deformaciones por el tensor de deformaciones linearizado en la formulación Lagrangiana

$$L_{ij} = \frac{1}{2} \left( \frac{\partial u_i}{\partial X_j} + \frac{\partial u_j}{\partial X_i} \right) = \frac{1}{2} (F_{ij} + F_{ji}) - \delta_{ij}$$

o en su formulación Euleriana

$$E_{ij} = \frac{1}{2} \left( \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right)$$

En este caso de pequeños desplazamientos, si  $\mathbf{u}(\mathbf{x}, t)$  es lo que se ha desplazado el punto  $\mathbf{x}$ , entonces  $d\mathbf{u}_i = \partial u_i / \partial x_j dx_j = U_{ij} dx_j$ . Al tensor  $U_{ij}$  le denominamos tensor gradiente de los desplazamientos. Si esta modificación que es lineal en los  $dx_i$  se puede poner como  $d\mathbf{u}_i = \epsilon_{ijk} \omega_k(\mathbf{x}, t) dx_j$ , la modificación en el punto  $\mathbf{x}$  de la variación  $d\mathbf{u} = \boldsymbol{\omega} \times d\mathbf{x}$ , corresponde a una rotación local. En este caso  $U_{ij} = U_{ji}$ . El tensor de deformaciones es, precisamente, la parte simétrica del tensor  $U_{ij}$

$$R_{ij} = \frac{1}{2} (U_{ij} + U_{ji})$$

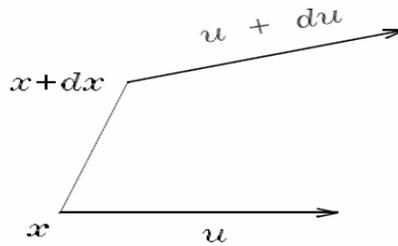


Figura 3.1 Representación vectorial de los desplazamientos de  $\mathbf{x}$  y  $\mathbf{u}$ .

en tanto que la parte antisimétrica de  $U_{ij}$  contiene información local de cómo ha rotado el medio alrededor del punto. Por eso, si el gradiente de desplazamientos  $U_{ij}$  es un tensor antisimétrico entonces  $R_{ij} = 0$ .

Según la figura, si dos puntos próximos distan  $dx_i$ , bajo una pequeña deformación distarán  $dx'_i = dx_i + du_i$ , por lo que

$$dx'^2 = dx^2 + 2 \frac{\partial u_i}{\partial x_k} dx_i dx_k + \frac{\partial u_i}{\partial x_k} \frac{\partial u_i}{\partial x_l} dx_k dx_l$$

El segundo término se puede escribir de forma más simétrica

$$2 \frac{\partial u_i}{\partial x_k} dx_i dx_k = \left( \frac{\partial u_i}{\partial x_k} + \frac{\partial u_k}{\partial x_i} \right) dx_i dx_k$$

Con lo que

$$dx'^2 = dx^2 + 2e_{ik} dx_i dx_k, \quad e_{ik} = \frac{1}{2} \left( \frac{\partial u_i}{\partial x_k} + \frac{\partial u_k}{\partial x_i} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \frac{\partial u_j}{\partial x_k} \right)$$

Si el gradiente del desplazamiento es pequeño, por ejemplo en las deformaciones de los sólidos, el término de primer orden en los desplazamientos

$$e_{ik} = \frac{1}{2} \left( \frac{\partial u_i}{\partial x_k} + \frac{\partial u_k}{\partial x_i} \right) = e_{ki} \quad (33)$$

## Estados de deformación planos

Otra de las características de las matrices  $n \times n$  simétricas es que sus valores propios son reales y los correspondientes vectores propios son vectores ortogonales. Si escogemos como base del espacio vectorial estos vectores propios, entonces en esta base la matriz queda representada como una matriz diagonal en la que los elementos de la diagonal son precisamente sus valores propios. Esto mismo es válido para los tensores simétricos. Cuando uno de los valores propios del tensor de deformación en un punto es nulo, entonces se dice que en ese punto el estado de deformaciones es plano y el tensor adopta la forma matricial

$$R_{ij} = \begin{pmatrix} R_{11} & R_{12} & 0 \\ R_{12} & R_{22} & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

## Tensor de velocidad de deformación

Vamos a expresar cómo se deforma un medio por unidad de tiempo. Lo que interesa medir es con qué velocidad cambian estos cambios de posición. Esto contrasta con el análisis de la deformación de un sólido que prácticamente permanece estático, del cual interesa medir su deformación global. Si

consideramos como anteriormente la variación del producto escalar  $\mathbf{dx} \cdot \delta\mathbf{x} - \mathbf{dX} \cdot \delta\mathbf{X}$  de dos elementos infinitesimales ahora lo que queremos es determinar cómo cambian por unidad de tiempo, esto es la  $d(\mathbf{dx} \cdot \delta\mathbf{x} - \mathbf{dX} \cdot \delta\mathbf{X})/dt = d(\mathbf{dx} \cdot \delta\mathbf{x})/dt$ , ya que tanto  $\mathbf{dX}$  como  $\delta\mathbf{X}$  no son funciones de  $t$ . Entonces

$$\frac{d(dx_i)}{dt} = \frac{\partial}{\partial t} \left( \frac{\partial f_i(X,t)}{\partial X_j} dX_j \right) = \frac{\partial}{\partial X_j} \left( \frac{\partial f_i(X,t)}{\partial t} \right) dX_j = \frac{\partial v_i(X,t)}{\partial X_j} dX_j = \frac{\partial v_i(X,t)}{\partial x_k} dx_k \quad (34)$$

pues

$$\frac{\partial v_i}{\partial X_j} dX_j = \frac{\partial v_i}{\partial x_k} \frac{\partial x_k}{\partial X_j} dX_j = \frac{\partial v_i}{\partial x_k} dx_k$$

Si ahora calculamos

$$\begin{aligned} \frac{d(\mathbf{dx} \cdot \mathbf{dx})}{dt} &= \frac{\partial v_i(x,t)}{\partial x_k} dx_k \delta x_i + dx_k \frac{\partial v_k(x,t)}{\partial x_i} \delta x_i = \left( \frac{\partial v_i}{\partial x_k} + \frac{\partial v_k}{\partial x_i} \right) dx_k \delta x_i \\ &= 2D_{ik} dx_k \delta x_i \end{aligned}$$

El gradiente espacial del campo de velocidad instantáneo define un tensor que lo llamamos tensor gradiente de velocidad  $Y_{ij} = \partial v_i / \partial x_j$ , el cual puede descomponerse en sus partes simétricas y antisimétricas  $D_{ij}$  y  $V_{ij}$ , respectivamente.  $\mathbf{Y} = \mathbf{D} + \mathbf{V}$ . Al tensor simétrico

$$D_{ij} = \frac{1}{2} \left( \frac{\partial v_i}{\partial x_j} + \frac{\partial v_j}{\partial x_i} \right) = D_{ji} = \frac{dR_{ij}}{dt}$$

donde  $v_i(x,t)$  es el campo de velocidad en el punto  $x$  en el instante  $t$ , se le denomina tensor de velocidad de deformación y está descrito en términos de las variables Eulerianas, y como acabamos de ver contiene la información que da cuenta de la velocidad de deformación (o deformación por unidad de tiempo) de  $\mathbf{dx} \cdot \delta\mathbf{x}$ , para cada par de elementos  $\mathbf{dx}$  y  $\delta\mathbf{x}$  alrededor de cualquier punto.

Al tensor antisimétrico

$$V_{ij} = \frac{1}{2} \left( \frac{\partial v_i}{\partial x_j} - \frac{\partial v_j}{\partial x_i} \right) = -V_{ji}$$

se le denomina tensor de vorticidad o giro y representará la velocidad angular de giro del medio alrededor de cada punto.

**Teorema** La condición necesaria y suficiente para que no exista deformación de una cierta región  $\mathcal{R}$  entre los instantes  $t_1$  y  $t_2$  es que el tensor de velocidad de deformación  $\mathbf{D}(\mathbf{x}, t) = \mathbf{0}$ , en todo punto  $\mathbf{x} \in \mathcal{R}$  de la región y para todo  $t \in (t_1, t_2)$ .

## 3.2 Tensiones

### Campo de densidad

Es un campo escalar. Si consideramos un cierto elemento de volumen  $dV = dx dy dz$  alrededor de un punto  $\mathbf{r}$  y en el instante  $t$ , el campo de densidad  $\rho(\mathbf{r}, t)$  es aquella función continua de  $\mathbf{r}$  y de  $t$  tal que en cada punto  $\rho(\mathbf{r}, t)dV = dm$  representa el valor de la masa del sistema en ese elemento de volumen.

### Campo de tensiones

Un medio continuo en general, en el que los distintos componentes interactúan entre sí deberemos conocer cuál es la fuerza que una parte del sistema hace sobre otra en los distintos puntos del mismo. Para ello es necesario definir cuál es el sistema sobre el cual vamos a considerar la fuerza que hace el resto del material, que se considera como el exterior al sistema.

Pueden existir dos tipos de fuerza: Una fuerza de tipo volumétrica que actúa sobre cada elemento de volumen que también recibe el nombre de fuerza másica (como la gravitatoria y electromagnética) y otro tipo de fuerza que actúa sobre cada elemento de superficie, bien sobre la superficie exterior de la frontera del medio continuo, bien sobre cada elemento de superficie de una parte del sistema por parte de otra como fuerza de contacto.

Supongamos pues una pequeña porción del medio continuo y fijémosnos en su superficie exterior. Cada elemento de superficie de valor  $dS$  tiene una orientación caracterizada por un vector unidad  $\mathbf{n}$  perpendicular al plano tangente en ese punto. A veces solemos representar dicho elemento de superficie por el vector  $d\mathbf{S} = \mathbf{n}dS$ . La fuerza de contacto que la materia exterior hace sobre este elemento de superficie dependerá tanto de la extensión  $dS$  como de la orientación  $\mathbf{n}$ . El Principio de tensión de Cauchy establece que en el límite cuando  $dS \rightarrow 0$  existe una fuerza resultante definida por unidad de área en dicho punto que solamente depende del punto

y de la orientación, y que el momento de las fuerzas sobre el elemento, respecto del punto, es cero.

Debemos por lo tanto definir en cada punto  $\mathbf{r}$  de un medio continuo (y en cada instante  $t$  en el caso de una evolución dinámica), una fuerza por unidad de área  $\mathbf{f}(\mathbf{r}, \mathbf{n})$  para cada posible valor de la orientación  $\mathbf{n}$ . De esa manera, sobre cada elemento de superficie de valor  $dS$  y orientación  $\mathbf{n}$  se ejercerá por parte de la materia exterior una fuerza de valor  $d\mathbf{F} = \mathbf{f}(\mathbf{r}, \mathbf{n})dS$ .

Aunque la expresión general de  $\mathbf{f}(\mathbf{r}, \mathbf{n})$  pudiera parecer muy complicada, pues cada una de sus tres componentes depende de seis variables  $x_i$  y  $n_j$   $i, j = 1, 2, 3$ , sin embargo la dependencia de la orientación es simple: es una dependencia lineal.

$$f_i(\mathbf{r}, \mathbf{n}) = \sigma_{ij}(\mathbf{r})n_j \quad (35)$$

A las 9 funciones (luego veremos que solo 6 son independientes)  $\sigma_{ij}(\mathbf{r})$  se les conoce con el nombre **de componentes del tensor de tensiones**  $\boldsymbol{\sigma}$  en el punto  $\mathbf{r}$ . El conocimiento de esas 9 funciones en cada punto, junto con (35), nos sirve para calcular en cada punto de un medio continuo la fuerza que una parte del sistema ejerce sobre otra. Tenemos así definido sobre el sistema material el campo tensorial de tensiones.

La expresión (35) también admite la representación matricial

$$\begin{pmatrix} f_1 \\ f_2 \\ f_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sigma_{11} & \sigma_{12} & \sigma_{13} \\ \sigma_{21} & \sigma_{22} & \sigma_{23} \\ \sigma_{31} & \sigma_{32} & \sigma_{33} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} n_1 \\ n_2 \\ n_3 \end{pmatrix}$$

Si denominamos por  $\mathbf{e}_i$  al vector unidad en la dirección  $x_i$  y por  $\boldsymbol{\sigma}$  queremos representar el tensor de tensiones en forma matricial, resulta que las componentes del tensor se pueden calcular, mediante

$$\sigma_{ij} = \mathbf{e}_i^T \cdot \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{e}_j$$

Esto nos servirá para calcular las componentes del tensor de tensiones en cualquier otro sistema de referencia ortogonal, como es el caso de usar coordenadas esféricas o cilíndricas. En efecto, si hacemos un cambio de base,  $\mathbf{e}'_i = R_{ij}\mathbf{e}_j$ , siendo  $R_{ij}$  la matriz de rotación de cambio de base, entonces

$$\sigma'_{ij} = \mathbf{e}'_i{}^T \cdot \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{e}'_j = R_{ik}\mathbf{e}_k^T \cdot \boldsymbol{\sigma} \cdot R_{jl}\mathbf{e}_l = R_{ik}R_{jl}\sigma_{kl}$$

que es la forma de transformar de un tensor.

Podemos observar, que la relación (35) entre la tensión  $\mathbf{f}$  y la orientación de la superficie  $\mathbf{n}$ , hace que si consideramos la superficie orientada en sentido contrario  $-\mathbf{n}$ , la fuerza sea la opuesta  $-\mathbf{f}$ , lo que garantiza que se verifica localmente la tercera ley de Newton, puesto que se intercambian los papeles de interior y exterior del elemento infinitesimal.

## Equilibrio estático. Simetría del tensor de tensiones

Si cada elemento de volumen  $dV$  está en equilibrio, las ecuaciones fundamentales de la dinámica establecen que la suma de las fuerzas exteriores y los momentos de las fuerzas exteriores respecto de un punto cualquiera deben ser cero.

Sea  $V$  un volumen arbitrario. La suma de fuerzas externas sobre él es

$$\int_{\mathcal{V}} \rho \mathbf{k} dV + \int_{\mathcal{S}(\mathcal{V})} \mathbf{f} dS$$

siendo  $\mathbf{k}$  la fuerza externa por unidad de masa (si se trata únicamente del campo gravitatorio como en muchos ejemplos, tomaremos  $\mathbf{k} = \mathbf{g}$ ). Como  $\mathbf{f}_i dS = \sigma_{ij} \mathbf{n}_j dS$ , la última integral extendida a la superficie cerrada  $\mathcal{S}(\mathcal{V})$  es en realidad el flujo exterior del campo  $\sigma_{ij}$ , por lo que el teorema de Gauss nos permite transformarla en una integral extendida al volumen  $\mathcal{V}$ , de la divergencia del campo. Así, la componente  $i$  de la fuerza total que actúa sobre el volumen  $\mathcal{V}$  se escribe:

$$\int_{\mathcal{V}} \left( \rho k_i + \frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_j} \right) dV$$

Como el volumen de integración es arbitrario, ya que la condición anterior se verifica para todo  $\mathcal{V}$ , entonces, en cada punto de un medio continuo se debe satisfacer

$$\rho k_i + \frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_j} = 0 \quad (36)$$

son las ecuaciones de equilibrio que satisfacen el tensor de tensiones  $\boldsymbol{\sigma}$ , el campo de densidad  $\rho$  y el campo exterior másico  $\mathbf{k}$ . Cuando el sistema no sea

estático, y exista por lo tanto una evolución, el segundo miembro de la ecuación (36) ya no será cero, sino que dependerá de la masa por unidad de volumen y de la aceleración del medio, de acuerdo con la segunda ley de Newton.

Los momentos de las fuerzas externas respecto del origen de coordenadas son

$$\int_{\mathcal{V}} \rho \mathbf{r} \times \mathbf{k} dV + \int_{S(\mathcal{V})} \mathbf{r} \times \mathbf{f} dS$$

Si usamos (36)

$$\rho(\mathbf{r} \times \mathbf{k})_i = \rho \epsilon_{ijl} x_j k_l = -\epsilon_{ijl} \frac{\partial \sigma_{lk}}{\partial x_k}$$

La componente  $i$  de la segunda integral, como  $\epsilon_{ijk} x_j f_k = \epsilon_{ijk} x_j \sigma_{kl} n_l$ , se expresa como un flujo y usando el teorema de Gauss nos lleva a

$$\int_{\mathcal{V}} -\epsilon_{ijl} \frac{\partial \sigma_{lk}}{\partial x_k} dV + \int_{\mathcal{V}} \frac{\partial}{\partial x_l} (\epsilon_{ijk} x_j \sigma_{kl}) dV = 0$$

Nos resulta

$$\int_{\mathcal{V}} \epsilon_{ilk} \sigma_{kl} dV = 0$$

que como el volumen es arbitrario, se tiene que en cada punto de un medio continuo estático,  $\epsilon_{ilk} \sigma_{kl} = 0$ , es decir  $\sigma_{kl} = \sigma_{lk}$  y el campo tensorial  $\boldsymbol{\sigma}$  es necesariamente simétrico.

## Direcciones principales. Tensiones principales

El tensor de tensiones  $\boldsymbol{\sigma}$ , considerado como matriz es una matriz real simétrica. Por lo tanto posee tres valores propios reales y sus vectores propios correspondientes son ortogonales. A las tres direcciones de sus vectores propios se les da el nombre de direcciones principales y a los correspondientes valores propios el nombre de tensiones principales. Si tomamos como ejes coordenados tres ejes paralelos a las direcciones

principales en un punto, entonces en ese punto el tensor de tensiones se escribe en la forma diagonal

$$\boldsymbol{\sigma} = \begin{pmatrix} \sigma_{(1)} & 0 & 0 \\ 0 & \sigma_{(2)} & 0 \\ 0 & 0 & \sigma_{(3)} \end{pmatrix}$$

siendo  $\sigma_{(i)}, i = 1, 2, 3$  las tres tensiones principales. En esas direcciones el estado de tensión del material en ese punto es solamente de tracción o compresión (según que la correspondiente  $\sigma_{(i)}$  sea positiva o negativa) ya que la fuerza por unidad de área tiene la misma dirección que el correspondiente vector propio  $\mathbf{n}_{(i)}$ .

Vemos pues que para calcular el estado de tensiones en un punto de un medio continuo, hay que medir solamente tres fuerzas en tres direcciones perpendiculares. Si los vectores unidad de los ejes coordenados son  $\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2$  y  $\mathbf{e}_3$ , entonces midiendo las fuerzas por unidad de área que se ejercen sobre cada sección transversal a las direcciones dadas por los vectores anteriores, y llamamos  $f_1, f_2$  y  $f_3$  a las correspondientes fuerzas por unidad de área, el tensor de tensiones se construye escribiendo por filas (o por columnas, debido a la simetría del tensor) sus nueve componentes:

$$\boldsymbol{\sigma} = \begin{pmatrix} f_{11} & f_{12} & f_{13} \\ f_{21} & f_{22} & f_{23} \\ f_{31} & f_{32} & f_{33} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} f_{11} & f_{21} & f_{31} \\ f_{12} & f_{22} & f_{32} \\ f_{13} & f_{23} & f_{33} \end{pmatrix}$$

De alguna manera el tensor de tensiones  $\boldsymbol{\sigma}$  es equivalente a la medida de tres vectores según tres direcciones ortogonales, con la restricción de que  $f_{ij} = f_{ji}$ .

## Tensor de tensiones del campo electromagnético

Si en un medio material establecemos un campo electromagnético, estamos aplicando unas fuerzas que se superponen a las fuerzas electromagnéticas de cohesión de la propia estructura molecular del sistema. El tensor de tensiones asociado al campo electromagnético en el vacío, en el sistema internacional de unidades, viene dado por

$$\sigma_{\mu\nu} = \epsilon_0 c^2 \left( -F_{\mu\alpha} F_{\nu}^{\alpha} + \frac{1}{4} g_{\mu\nu} F_{\alpha\beta} F^{\alpha\beta} \right)$$

donde de las componentes con subíndices 0 llamados subíndices temporales,  $h = \sigma_{00}$  representa la densidad de energía del campo y  $g_i \equiv \sigma^{0i}/c = \sigma^{i0}/c$  la densidad de momento lineal y las componentes  $\sigma_{ij}$ ,  $i, j = 1, 2, 3$  son propiamente las componentes del tensor de tensiones de Maxwell.  $\Gamma_{\mu\nu} = \text{diag}(1, -1, -1, -1)$  es el tensor métrico de Minkowski.

El tensor campo electromagnético viene dado por:

$$F_{\alpha\beta} = \frac{\partial A_\beta}{\partial x_\alpha} - \frac{\partial A_\alpha}{\partial x_\beta}, \quad A_\alpha \equiv (\phi/c, -\mathbf{A})$$

siendo  $\phi$  el potencial escalar y  $\mathbf{A}$  el potencial vector. Con el índice 0 la variable  $x_0 = ct$ . En forma matricial y en términos del campo eléctrico y magnético, resulta:

$$F_{\alpha\beta} \equiv \begin{pmatrix} 0 & E_x/c & E_y/c & E_z/c \\ -E_x/c & 0 & -B_z & B_y \\ -E_y/c & B_z & 0 & -B_x \\ -E_z/c & -B_y & B_x & 0 \end{pmatrix}, \quad F^{\alpha\beta} \equiv \begin{pmatrix} 0 & -E_x/c & -E_y/c & -E_z/c \\ E_x/c & 0 & -B_z & B_y \\ E_y/c & B_z & 0 & -B_x \\ E_z/c & -B_y & B_x & 0 \end{pmatrix}$$

$$h = \sigma_{00} = \frac{\epsilon_0}{2} (E^2 + c^2 B^2), \quad g_i = \sigma^{0i}/c = \epsilon_0 (\mathbf{E} \times \mathbf{B})_i$$

$$\sigma_{ij} = -\epsilon_0 \left( E_i E_j + c^2 B_i B_j - \frac{1}{2} \delta_{ij} (E^2 + c^2 B^2) \right)$$

### 3.3 Dinámica Leyes fundamentales

#### Ecuación de continuidad de la masa

La masa de un medio continuo viene descrita por el conocimiento del campo de densidad  $\rho$ . Si la densidad es  $\rho_0(\mathbf{X}, 0)$  en el instante inicial y ocupa un volumen  $V_0$  y al cabo del tiempo  $t$  tiene una densidad  $\rho(\mathbf{x}, t)$  y ocupa un volumen  $V$ , resulta

$$m = \int_{V_0} \rho_0(\mathbf{X}, 0) dV_0 = \int_V \rho(\mathbf{x}, t) dV \quad (37)$$

Vamos a admitir que la masa de un medio continuo se conserva en el tiempo. La derivada material de (37) se debe anular

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \int_V \rho(\mathbf{x}, t) dV &= \int_V \left( \frac{\partial \rho(\mathbf{x}, t)}{\partial t} + \nabla \rho(\mathbf{x}, t) \cdot \mathbf{v} \right) dV + \int_V \rho(\mathbf{x}, t) \frac{d}{dt} dV \\ &= \int_V \left( \frac{\partial \rho(\mathbf{x}, t)}{\partial t} + \nabla \rho(\mathbf{x}, t) \cdot \mathbf{v} + \rho(\mathbf{x}, t) \nabla \cdot \mathbf{v} \right) dV = 0 \end{aligned}$$

Esto debe ser válido para todo el sistema y para cualquier parte del mismo. Si consideramos un volumen  $dV$ , arbitrario e infinitesimal, obtenemos

$$\frac{\partial \rho(\mathbf{x}, t)}{\partial t} + \nabla \rho(\mathbf{x}, t) \cdot \mathbf{v} + \rho(\mathbf{x}, t) \nabla \cdot \mathbf{v} = \frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v}) = 0 \quad (38)$$

que también se puede poner

$$\frac{d\rho}{dt} + \rho \nabla \cdot \mathbf{v} = 0$$

La evolución del sistema se dice que es **incompresible** si cada partícula material (cada elemento infinitesimal) de volumen no cambia su densidad, es decir  $d\rho/dt = 0$ , por lo que en este caso de sistema incompresible la ecuación de continuidad de la masa queda  $\rho \nabla \cdot \mathbf{v} = 0$ , y como la densidad, aunque sea función de punto, es en general definida positiva resulta  $\nabla \cdot \mathbf{v} = 0$ : el campo de velocidad es necesariamente de divergencia nula y se dice que es solenoidal. Las líneas del campo de velocidad o bien se cierran sobre ellas mismas o su origen y final tiene lugar sobre la superficie de contorno del medio continuo.

Si la evolución es estacionaria,  $\rho$  no es función explícita de  $t$  y la ecuación de continuidad se escribe:

$$\nabla \cdot (\rho \mathbf{v}) = 0$$

en la que la evolución no es necesariamente solenoidal, puesto que en general la densidad no tiene por qué ser independiente del punto, por ejemplo en un gas.

## Segunda ley de Newton

Es la segunda Ley de Newton la que establece que si las fuerzas internas de un sistema material obedecen a la tercera Ley de Newton (Principio de acción y reacción) entonces la variación por unidad de tiempo del momento lineal del sistema (cantidad de movimiento) es igual a la suma de las fuerzas externas que actúan sobre el sistema.

Como por sistema material podemos considerar cualquier parte de nuestro medio continuo. Consideremos la materia que está dentro del volumen  $V$  de frontera o superficie exterior  $S(\mathcal{V})$ , que está en contacto con el medio continuo que le rodea. Supongamos que el exterior hace sobre el medio material una fuerza másica por unidad de volumen  $\mathbf{k}$ , entonces la segunda Ley de Newton nos lleva a

$$\frac{d}{dt} \int_{\mathcal{V}} \rho \mathbf{v} dV = \int_{\mathcal{V}} \rho \mathbf{k} dV + \int_{S(\mathcal{V})} \mathbf{f} dS$$

donde la última integral está extendida a la superficie exterior de nuestro volumen  $S(\mathcal{V})$ , y representa la fuerza de contacto  $f_i = \sigma_{ij} n_j$  que el resto del material hace sobre nuestro sistema. Usando el teorema de Gauss para convertir la integral de superficie en una de volumen, y como lo anterior se verifica para cualquier  $V$  del medio material, esto implica que en cada punto de nuestro medio continuo se satisface

$$\frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_j} + \rho k_i = \rho \frac{dv_i}{dt} \quad (39)$$

Si el material estuviera eléctricamente cargado, por ejemplo un plasma y tuviera una densidad volumétrica de carga  $\rho_e$ , si se aplica un campo eléctrico externo  $\mathbf{E}$ , además de la fuerza másica  $\mathbf{k}$ , en el miembro de la izquierda de (39) existirá otro término de la forma  $\rho_e \mathbf{E}$ .

## Momento de la cantidad de movimiento. Simetría de $\sigma_{ij}$

Si cada par de fuerzas internas que satisfacen el principio de acción y reacción están aplicadas en el mismo punto, entonces sus momentos respecto de un punto arbitrario son nulos y nos lleva a que la variación por unidad de tiempo

del momento angular de un sistema respecto de un punto fijo es igual al momento, respecto de ese punto fijo, de todas las fuerzas externas.

Si consideramos como en el apartado anterior el mismo volumen del medio continuo y consideramos como punto fijo el origen del sistema de coordenadas se llega a:

$$\frac{d}{dt} \int_{\mathcal{V}} \rho \mathbf{r} \times \mathbf{v} dV = \int_{\mathcal{V}} \rho \mathbf{r} \times \mathbf{k} dV + \int_{S(\mathcal{V})} \mathbf{r} \times \mathbf{f} dS$$

Esta ecuación no suministra ninguna ecuación diferencial adicional, pero nos lleva a que  $\sigma_{ij} = \sigma_{ji}$  y el tensor de tensiones del medio material es necesariamente simétrico.

En efecto, si la integral de superficie la transformamos en una integral de volumen, y de todo lo anterior analizamos una de sus componentes, resulta:

$$\frac{d}{dt} \int_{\mathcal{V}} (\rho \mathbf{r} \times \mathbf{v})_i dV = \int_{\mathcal{V}} \left( \frac{d\rho}{dt} \epsilon_{ijk} r_j v_k + \rho \epsilon_{ijk} \frac{dr_j}{dt} v_k + \rho \epsilon_{ijk} r_j \frac{dv_k}{dt} + \rho \epsilon_{ijk} r_j v_k v_{l,l} \right) dV$$

Ahora bien, el primero y el cuarto término dan lugar a

$$\epsilon_{ijk} r_j v_k \left( \frac{d\rho}{dt} + \rho v_{l,l} \right) = 0$$

debido a la ecuación de continuidad de la masa. El segundo es también cero pues  $dr_j/dt = v_j$  y  $\epsilon_{ijk} v_j v_k$ . El término que sobrevive es el

$$\int_{\mathcal{V}} \rho \epsilon_{ijk} r_j \frac{dv_k}{dt} dV$$

En el segundo miembro, la componente i resulta ser

$$\int_{\mathcal{V}} \left( \rho \epsilon_{ijk} r_j k_l + \frac{\partial}{\partial r_l} (\epsilon_{ijk} r_j \sigma_{kl}) \right) dV$$

Pero

$$\frac{\partial}{\partial r_l} (\epsilon_{ijk} r_j \sigma_{kl}) = \epsilon_{ijk} \delta_{jl} \sigma_{kl} + \epsilon_{ijk} r_j \frac{\partial \sigma_{kl}}{\partial r_l}$$

con lo que

$$\epsilon_{ijk} r_j \rho \frac{dv_k}{dt} = \epsilon_{ijl} r_j \rho k_l + \epsilon_{ijk} r_j \frac{\partial \sigma_{kl}}{\partial r_l} + \epsilon_{ilk} \sigma_{kl}$$

que si utilizamos la ecuación de la dinámica (39) el único término que sobrevive es el  $\epsilon_{ilk} \sigma_{kl} = 0$ .

Esto no sería así si por ejemplo el exterior aplicara momentos pero no fuerzas, como es el caso de un material ferromagnético en un campo magnético exterior uniforme. Además de los momentos de las fuerzas externas, habría que haber incluido en el segundo miembro de la ecuación anterior un término de la forma  $\int \boldsymbol{\mu} \times \mathbf{B} dV$ , donde  $\boldsymbol{\mu}$  es la densidad volumétrica de momento magnético del material y  $\mathbf{B}$  el campo magnético exterior aplicado.

## Conservación de la energía. Primer principio de la Termodinámica

Si la única interacción es de tipo mecánico y no hay aporte energético en forma de calor sobre el sistema, entonces a partir de las ecuaciones de la dinámica (39), multiplicando escalarmente por el desplazamiento  $d\mathbf{r}$  de cada punto (o bien por el vector velocidad de cada punto si lo que queremos es determinar el trabajo por unidad de tiempo) se define el trabajo por unidad de volumen (o por unidad de volumen y de tiempo) como el trabajo de las fuerzas volumétricas externas y las fuerzas de tensión

$$v_i \frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_j} + \rho v_i k_i = \rho \frac{dv_i}{dt} v_i = \rho \frac{1}{2} \frac{dv^2}{dt} \quad (40)$$

que se iguala a la variación por unidad de tiempo de la energía cinética por unidad de volumen. La ecuación local anterior la integramos a todo el medio continuo, y llamando

$$K = \int_{\mathcal{V}} \frac{\rho v^2}{2} dV, \quad \frac{dK}{dt} = \int_{\mathcal{V}} \rho \frac{1}{2} \frac{dv^2}{dt} dV \quad (41)$$

a la variación de la energía cinética del sistema, y como  $v_i \frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_j} = \frac{\partial (v_i \sigma_{ij})}{\partial x_j}$  y por otra parte  $\frac{\partial v_i}{\partial x_j} = Y_{ij} = D_{ij} + V_{ij}$ , resulta  $\frac{\partial v_i}{\partial x_j} \sigma_{ij} = D_{ij} \sigma_{ij}$ , ya que la vorticidad  $V_{ij} = -V_{ji}$ . Al hacer la integral de volumen de la divergencia  $\frac{\partial (v_i \sigma_{ij})}{\partial x_j}$  se nos transforma en una integral de superficie extendida a la superficie exterior del medio, del flujo del campo vectorial  $v_i \sigma_{ij}$ . Separando términos obtenemos

$$\frac{dK}{dt} + \int_{\mathcal{V}} D_{ij} \sigma_{ij} dV = \int_{S(\mathcal{V})} v_i \sigma_{ij} n_j dS + \int_{\mathcal{V}} \rho v_i k_i dV \quad (42)$$

que se puede resumir diciendo que en el miembro de la derecha tenemos el trabajo por unidad de tiempo de las fuerzas externas que actúan sobre la superficie del medio continuo  $S(\mathcal{V})$  y el trabajo de las fuerzas volumétricas, que es igual a los términos del primer miembro que representan la variación por unidad de tiempo de la energía cinética del sistema y la variación por unidad de tiempo del trabajo de las fuerzas internas, que se suele llamar energía mecánica interna  $U$ .

$$\frac{dK}{dt} + \frac{dU}{dt} = \text{Trabajo de las fuerzas externas}$$

Llamemos  $u$  a la función que nos define la energía interna por unidad de masa, de tal manera que

$$U = \int_{\mathcal{V}} \rho u dV \quad (43)$$

Si hubiera un aporte de energía térmica por unidad de tiempo y unidad de volumen mediante una generación interna de calor  $q$  y a su vez un aporte de un flujo externo de calor a través de la superficie exterior mediante un campo  $\mathbf{j}$  entonces

$$\frac{\delta Q}{\delta t} = \int_{\mathcal{V}} q dV - \int_{S(\mathcal{V})} \mathbf{j} \cdot \mathbf{n} dS$$

donde la segunda integral se extiende a la superficie del medio siendo  $\mathbf{n}$  el vector unidad perpendicular a la superficie y dirigido hacia el exterior con lo

que el signo menos indica que calculamos el flujo de calor que “entra”. Por ejemplo, el flujo de calor  $\mathbf{j}$  en un medio homogéneo e isótropo está relacionado con la temperatura mediante  $\mathbf{j} = -\kappa\nabla T$ , siendo  $\kappa$  la conductividad del medio.

La ecuación de conservación de la energía (por unidad de tiempo) o primer principio de la Termodinámica se expresa de forma global:

$$\frac{dK}{dt} + \frac{dU}{dt} = \frac{\delta W}{\delta t} + \frac{\delta Q}{\delta t}$$

A las magnitudes  $W$  y  $Q$  los términos de la forma  $\delta W/\delta t$  no quieren representar derivadas temporales, ya que las funciones  $W$  y  $Q$  no son campos o propiedades globales que se puedan derivar como es el caso de  $K$  y de  $U$  o de sus campos locales  $\rho v^2(\mathbf{x}, t)/2$  y  $\rho u(\mathbf{x}; t)$ .

Si las integrales de superficie las ponemos como integrales de volumen podemos recuperar la forma local de la ley de conservación de la energía:

$$\rho \frac{d}{dt} \left( \frac{v^2}{2} + u \right) = \frac{\partial (v_i \sigma_{ij})}{\partial x_j} + \rho v_i k_i + q - \nabla \cdot \mathbf{j}$$

y utilizando (39) se llega a

$$\frac{du}{dt} = \frac{1}{\rho} (\sigma_{ij} D_{ij} + q - \nabla \cdot \mathbf{j}) \quad (44)$$

que la podemos enunciar como: La variación de la energía específica interna por unidad de tiempo es igual al trabajo por unidad de volumen y de tiempo de las fuerzas internas de tensión más el aporte de calor por unidad de tiempo.

## Segundo Principio de la Termodinámica

Si admitimos que además de energía mecánica se intercambia calor con el exterior, deberemos tener presente el Segundo Principio de la Termodinámica. Puesto que la evolución no pasa necesariamente por estados de equilibrio termodinámico entonces la variación de la entropía del sistema

debe ser mayor o a lo sumo igual a la entropía que entra en el sistema por su superficie exterior más la entropía que se genera en su interior. Así:

$$\frac{d}{dt} \int_{\mathcal{V}} \rho s dV \geq - \int_{\partial \mathcal{V}} \frac{\mathbf{j} \cdot \mathbf{n}}{T} dS + \int_{\mathcal{V}} \rho e dV \quad (45)$$

siendo  $s$  la entropía específica y  $e$  la producción interna de entropía por unidad de masa y unidad de tiempo que estará expresada en términos del aporte volumétrico de calor  $\mathbf{q}$  y de la temperatura del medio. Si la última integral la transformamos en una integral de volumen, obtenemos la desigualdad local conocida como desigualdad de Clausius-Duhem:

$$\frac{ds}{dt} - e + \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial x_i} \left( \frac{j_i}{T} \right) \geq 0 \quad (46)$$

## Ecuaciones constitutivas

Ecuación de continuidad

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial(\rho v_j)}{\partial x_j} = 0 \quad (47)$$

Ecuación del movimiento

$$\frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_j} + \rho k_i = \rho \dot{v}_i, \quad i = 1,2,3$$

Primer principio de la Termodinámica

$$\frac{du}{dt} = \frac{1}{\rho} (\sigma_{ij} D_{ij} + \mathbf{q} - \nabla \cdot \mathbf{j}) \quad (48)$$

Si suponemos conocidas las fuerzas volumétricas externas  $k_i$  y los aportes de calor  $q$ , las incógnitas son las 14 variables o campos  $\rho$ ,  $v_i$ ,  $\sigma_{ij}$ ,  $j_i$  y  $u$ . Como además se ha de cumplir el Segundo principio de la Termodinámica

$$\frac{ds}{dt} - e + \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial x_i} \left( \frac{j_i}{T} \right) \geq 0 \quad (49)$$

tenemos una desigualdad que añade dos variables más  $s$  y  $T$ . Como hay un total de 16 variables o campos y 5 ecuaciones más una desigualdad, es necesario suministrar once condiciones o ecuaciones adicionales que dependan de la estructura del medio continuo. Tres serán del tipo  $j_i = -\kappa_{ij} \frac{\partial T}{\partial x_j}$  que nos relacionan el flujo de calor con la temperatura y con unos parámetros físicos, la conductividad térmica  $\kappa_{ij}$  del medio. Dos serán las ecuaciones termodinámicas de estado del medio continuo que nos ligarán la densidad  $\rho$ , el estado de tensiones  $\sigma_{ij}$ , la energía interna y la entropía con la temperatura  $T$ . Las otras seis restantes que reciben el nombre de ecuaciones constitutivas, reflejarán la estructura y propiedades físicas del medio continuo.

### 3.4 Elasticidad

Módulo de Young ( $Y$ ): En un medio material elástico de longitud  $l$  si lo sometemos a una fuerza por unidad de área o tensión  $F/A$ , se deformará en la dirección de aplicación de la fuerza una longitud  $\Delta l$  tal que

$$\frac{F}{A} = Y \frac{\Delta l}{l}$$

Coefficiente de Poisson ( $\sigma$ ): Generalmente, en las direcciones perpendiculares a la de la fuerza aplicada, sufrirá una deformación de sentido contrario (contracción o extensión), tal que la deformación  $\Delta h$  en una dirección transversal de longitud original  $h$

$$\frac{\Delta h}{h} = -\sigma \frac{\Delta l}{l}$$

El signo menos hace referencia a la deformación en sentido contrario. Los dos parámetros  $Y$  y  $\sigma$  dependen de la naturaleza del material y no de sus

dimensiones o forma. Y tiene dimensiones de fuerza por unidad de área en tanto que  $\sigma$  es adimensional. Generalmente  $0 \leq \sigma \leq 1/2$ .

## Ley de Hooke generalizada

En el caso de pequeñas deformaciones, si representamos por  $e_{ij}$  el tensor de deformaciones linearizado en la descripción Euleriana, la Ley de Hooke generalizada establece que existe una relación lineal entre el tensor de tensiones y el tensor de deformaciones. La expresión general de esta relación es

$$\sigma_{ij} = C_{ijkl}e_{kl}, \quad e_{ij} = \frac{1}{2} \left( \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \quad (50)$$

## Tensor elástico. Constantes elásticas

Al tensor  $C_{ijkl}$  se le denomina tensor elástico. En principio tiene  $3^4 = 81$  componentes, pero debido a que  $\sigma$  y  $e$  por ser simétricos solamente tienen 6 componentes independientes cada uno, se reduce a un conjunto de 36 componentes independientes.

Si es posible expresar la densidad de energía de deformación, por unidad de volumen

$$u^* = \rho u = \frac{1}{2} C_{ijkl} e_{ij} e_{kl} = \frac{1}{2} C_{KL} e_K e_L, \quad K, L = 1, \dots, 6, \quad C_{KL} = C_{LK}$$

entonces el tensor elástico tiene 21 componentes independientes, que se corresponde con un sólido cristalino del sistema triclinico.

**Teorema** La condición necesaria y suficiente para que exista una función de energía de deformación  $u$  es que los coeficientes del tensor elástico satisfagan las condiciones

$$C_{ijkl} = C_{klij}$$

en cuyo caso

$$u = \frac{1}{2} C_{ijkl} e_{ij} e_{kl}, \quad \sigma_{ij} = \rho \frac{\partial u}{\partial e_{ij}}, \quad C_{ijkl} = \rho \frac{\partial^2 u}{\partial e_{ij} \partial e_{kl}}$$

Si los efectos térmicos no juegan un papel importante y los procesos que analizamos los podemos considerar como adiabáticos, entonces el primer principio de la termodinámica nos lleva a que si la energía interna es una función del estado de deformación del medio, y por lo tanto una función del tensor de deformaciones  $e_{ij}$ , se tiene de (44)

$$\frac{du}{dt} = \frac{1}{\rho} \sigma_{ij} D_{ij} = \frac{1}{\rho} \sigma_{ij} \frac{de_{ij}}{dt}, \quad \frac{du}{dt} = \frac{\partial u}{\partial e_{ij}} \frac{de_{ij}}{dt}$$

con lo que

$$\sigma_{ij} = \rho \frac{\partial u}{\partial e_{ij}}, \quad \Rightarrow \quad \rho \frac{\partial u}{\partial e_{ij}} = C_{ijkl} e_{kl}, \quad u = \frac{1}{2\rho} C_{ijkl} e_{ij} e_{kl}$$

En el caso de medios isótropos de las 36 componentes solamente 2 son independientes, por lo que las características elásticas de un material dependen solamente dos constantes: El módulo de Young  $Y$  (o módulo elástico) y el coeficiente de Poisson  $\sigma$ .

$$u = \frac{1}{2\rho} C_{ijkl} e_{ij} e_{kl} = \frac{1}{2\rho} (C_{xxxx} e_{xx}^2 + C_{xxyy} e_{xx} e_{yy} + \dots)$$

Si la energía interna del medio elástico viene expresada por la relación

$$u = \frac{1}{2\rho} C_{ijkl} e_{ij} e_{kl} = \frac{1}{2\rho} (C_{xxxx} e_{xx}^2 + C_{xxyy} e_{xx} e_{yy} + \dots)$$

y el sistema tiene simetría de reflexión en la dirección  $OY$ , entonces una deformación en esa dirección, seguida de una inversión espacial, produce un valor de  $e'_{xy} = -e_{xy}$ , por lo que como la energía interna debe ser invariante, resulta que los coeficientes  $C_{xxyy} = C_{zzzz}$  y en general aquellos que contengan un número impar de  $y$ 's y lo mismo para el resto de las variables. Si el medio material posee simetría cúbica, además de las tres reflexiones según los tres ejes, también posee simetría en las permutaciones  $x \rightarrow y \rightarrow z$  de forma cíclica, por lo que los únicos coeficientes distintos de cero serán:  $C_{xxxx} = C_{yyyy} = C_{zzzz} = C_{xxyy} = C_{xxzz} = C_{yyxx} = \dots$ ,  $C_{xyxy} = C_{xzzz} =$

$C_{zyzy} = \dots$  con lo que la energía por unidad de volumen y de masa tendrá la forma

$$u = \frac{1}{2\rho} \{ C_{xxxx} (e_{xx}^2 + e_{yy}^2 + e_{zz}^2) + 2C_{xxyy} (e_{xx}e_{yy} + e_{xx}e_{zz} + e_{zz}e_{yy}) + 4C_{xyxy} (e_{xy}^2 + e_{xz}^2 + e_{yz}^2) \}$$

Si enumeramos las componentes del tensor de tensiones y de deformaciones de acuerdo con los seis índices  $\sigma_1 = \sigma_{11}, \sigma_2 = \sigma_{22}, \sigma_3 = \sigma_{33}, \sigma_4 = \sigma_{23}, \sigma_5 = \sigma_{31}, \sigma_6 = \sigma_{12}$ , y lo mismo para  $e_{ij}$  la relación más general en el caso de simetría cúbica será de la forma  $\sigma_I = C_{IJ}e_J$ ,  $I, J = 1, \dots, 6$ .

$$\begin{pmatrix} \sigma_1 \\ \sigma_2 \\ \sigma_3 \\ \sigma_4 \\ \sigma_5 \\ \sigma_6 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} C_{xxxx} & C_{xxyy} & C_{xxyy} & 0 & 0 & 0 \\ C_{xxyy} & C_{xxxx} & C_{xxyy} & 0 & 0 & 0 \\ C_{xxyy} & C_{xxyy} & C_{xxxx} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 2C_{xyxy} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 2C_{xyxy} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 2C_{xyxy} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e_1 \\ e_2 \\ e_3 \\ e_4 \\ e_5 \\ e_6 \end{pmatrix}$$

La última parte diagonal proviene de que el último sumando debe escribirse en la notación indicial Como

$$4C_{xyxy} (e_{xy}^2 + e_{xz}^2 + e_{yz}^2) = 2(e_{xy}^2 + e_{yx}^2 + e_{xz}^2 + e_{zx}^2 + e_{yz}^2 + e_{zy}^2)$$

En el caso isótropo, como la traza es una propiedad invariante, resulta que

$$\text{Tr}(\sigma_{ij}) = \sigma_{11} + \sigma_{22} + \sigma_{33} = (C_{xxxx} + 2C_{xxyy})\text{Tr}(e_{ij})$$

con lo que esta suma define un único coeficiente físico, y el otro independiente tiene que ser el  $C_{xyxy}$ . Por lo tanto existirá una relación  $f(C_{xxxx}, C_{xxyy}, C_{xyxy}) = 0$ . El tensor elástico tiene los tres coeficientes el  $C_{xxxx} = \lambda + 2\mu$ ,  $C_{xxyy} = \mu$ , que no son independientes pues  $C_{xxxx} = C_{xxyy} + 2C_{xyxy}$ , por lo que solamente dos de ellos son independientes.

$$\begin{pmatrix} \sigma_1 \\ \sigma_2 \\ \sigma_3 \\ \sigma_4 \\ \sigma_5 \\ \sigma_6 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \lambda + 2\mu & \lambda & \lambda & 0 & 0 & 0 \\ \lambda & \lambda + 2\mu & \lambda & 0 & 0 & 0 \\ \lambda & \lambda & \lambda + 2\mu & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 2\mu & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 2\mu & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 2\mu \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e_1 \\ e_2 \\ e_3 \\ e_4 \\ e_5 \\ e_6 \end{pmatrix}$$

Se suelen tomar como componentes independientes las componentes  $C_{xxyy} = \lambda$ , y  $C_{xyxy} = \mu$  de tal manera que  $\lambda$  y  $\mu$  se conocen como coeficientes de Lamé del medio isótropo. La relación entre ambos tipos de coeficientes es

$$C_{xxyy} = \lambda = \frac{Y}{1+\sigma} \left( \frac{\sigma}{1-2\sigma} \right), \quad C_{xyxy} = \mu = \frac{Y}{2(1+\sigma)} \quad (51)$$

Cuando sometemos un cuerpo a cortadura pura, la relación entre la tensión de cortadura  $\tau$  y la deformación angular del material  $\theta$ , viene dada por  $\tau = \mu\theta$ , y al coeficiente de proporcionalidad  $\mu$  se le llama módulo de torsión (o módulo de rigidez) y es precisamente el coeficiente  $\mu$  de Lamé.

## Ley de Hooke de medios isótropos

Que en los medios isótropos solamente dos coeficientes son suficientes se ve ya que la relación debe ser lineal e independiente de la orientación. Una posibilidad es que  $\sigma_{ij} = K e_{ij}$ , pero como la traza del tensor  $e_{ij}$ , es también una función lineal e invariante del tensor, la posibilidad es que  $\sigma_{ij} = K e_{ij} + L(e_{kk})\delta_{ij}$ .

En los medios isótropos, los coeficientes  $C_{ijij} = \lambda$   $i \neq j$ ,  $C_{iiii} = \lambda + 2\mu$ , y los  $C_{ijij} = \mu$   $i \neq j$ , de tal manera que los que no son de esta forma, son nulos.

$$\sigma_{ij} = \lambda \delta_{ij} e_{kk} + 2\mu e_{ij}$$

Esta ecuación se puede invertir para obtener el tensor de deformaciones linealizado en términos del tensor de tensiones

$$e_{ij} = \frac{-\lambda}{2\mu(3\lambda + 2\mu)} \delta_{ij} \sigma_{kk} + \frac{1}{2\mu} \sigma_{ij}, \quad e_{ij} = \frac{1 + \sigma}{Y} \sigma_{ij} - \frac{\sigma}{Y} \delta_{ij} \sigma_{kk}$$

Si las deformaciones producidas en un medio isótropo no modifican su volumen, entonces como hemos visto esto trae consigo que la traza  $e_{kk} = 0$ , el coeficiente  $\lambda$ , no juega ningún papel pues  $\sigma_{ij} = 2\mu e_{ij}$ , y esto traerá consigo que la velocidad de propagación de las perturbaciones dependa solamente de  $\mu$ .

Resumiendo, en un medio homogéneo e isótropo el tensor elástico tiene la forma:

$$C_{ijkl} = \lambda \delta_{ij} \delta_{kl} + \mu (\delta_{ik} \delta_{jl} + \delta_{il} \delta_{jk})$$

y la energía de deformación queda

$$u = \frac{1}{2\rho} (\lambda (e_{kk})^2 + 2\mu (e^2)_{kk})$$

La forma explícita de las distintas componentes del tensor de tensiones y del tensor de deformaciones son:

$$\sigma_{xx} = \frac{Y}{(1+\sigma)(1-2\sigma)} [(1-\sigma)e_{xx} + \sigma(e_{yy} + e_{zz})]$$

$$\sigma_{yy} = \frac{Y}{(1+\sigma)(1-2\sigma)} [(1-\sigma)e_{yy} + \sigma(e_{xx} + e_{zz})]$$

$$\sigma_{zz} = \frac{Y}{(1+\sigma)(1-2\sigma)} [(1-\sigma)e_{zz} + \sigma(e_{xx} + e_{yy})]$$

$$\sigma_{xy} = \frac{Y}{1+\sigma} e_{xy}, \quad \sigma_{yz} = \frac{Y}{1+\sigma} e_{yz}, \quad \sigma_{xz} = \frac{Y}{1+\sigma} e_{xz}$$

y recíprocamente

$$e_{xx} = \frac{1}{Y} [\sigma_{xx} - \sigma(\sigma_{yy} + \sigma_{zz})], \quad e_{yy} = \frac{1}{Y} [\sigma_{yy} - \sigma(\sigma_{xx} + \sigma_{zz})],$$

$$e_{zz} = \frac{1}{Y} [\sigma_{zz} - \sigma(\sigma_{xx} + \sigma_{yy})]$$

$$e_{xy} = \frac{Y}{1+\sigma} \sigma_{xy}, \quad e_{yz} = \frac{Y}{1+\sigma} \sigma_{yz}, \quad e_{xz} = \frac{Y}{1+\sigma} \sigma_{xz}$$

## Consideraciones termodinámicas

La variación de la energía interna de un medio continuo se expresa como

$$dU = TdS + \sigma_{ij}e_{ij} \quad (52)$$

como la variación debida al cambio de entropía y el cambio debido a la deformación, supuesta ésta pequeña.

En el caso de un fluido,  $\sigma_{ij} = -p\delta_{ij}$  y la traza del tensor de deformaciones  $e_{ii} = dV/V$ , por lo que por unidad de volumen

$$dU = TdS - pdV \quad (53)$$

Si definimos la energía libre de Helmholtz de un medio material mediante  $F = U - TS$ , resulta que la variación de la energía libre

$$dF = -SdT + \sigma_{ij}e_{ij} \quad (54)$$

En términos de las deformaciones la energía libre de Helmholtz se expresa:

$$F = F_0 + \frac{1}{2}\lambda(e_{ii})^2 + \mu(e_{ij}e_{ij}) = F_0 + \mu\left(e_{ij} - \frac{1}{3}\delta_{ij}e_{kk}\right)^2 + \frac{1}{2}Ke_{kk}^2$$

$$F = F_0 + \mu\left(e_{ij} - \frac{1}{3}\delta_{ij}e_{kk}\right)^2 + \frac{1}{2}Ke_{kk}^2 \quad (55)$$

donde  $F_0$  es la energía libre en ausencia de deformación y  $K = Y/3(1 - 2\sigma)$ , el módulo elástico volumétrico.

## Estados de tensión planos

En estados de tensión planos, es decir  $\sigma_{3i} = 0$ ,  $i = 1, 2, 3$ , entonces las únicas componentes no nulas del tensor de tensiones son las  $\sigma_{ij}(x_1, x_2)$ ,  $i, j = 1, 2$  que solamente son funciones de  $x_1$  y de  $x_2$ , y lo mismo sucede para las componentes no nulas del tensor de deformaciones  $e_{ij}$ .

$$\sigma_{ij} = \begin{pmatrix} \sigma_{11} & \sigma_{12} & 0 \\ \sigma_{12} & \sigma_{22} & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad e_{ij} = \begin{pmatrix} e_{11} & e_{12} & 0 \\ e_{12} & e_{22} & 0 \\ 0 & 0 & e_{33} \end{pmatrix}$$

Si además suponemos que estamos en una situación estática y sin fuerzas másicas externas, resulta que la ecuación dinámica se nos transforma en la  $\partial\sigma_{ij}/\partial x_j = 0$  lo que da lugar a que las componentes no nulas del tensor se pueden construir a partir de una función de esas dos variables  $\phi(x_1, x_2)$ , que recibe el nombre de función de Airy tal que

$$\sigma_{11} = -\frac{\partial^2\phi}{\partial x_2^2}, \quad \sigma_{12} = -\frac{\partial^2\phi}{\partial x_1 \partial x_2}, \quad \sigma_{22} = -\frac{\partial^2\phi}{\partial x_1^2}$$

Como las ecuaciones que verifica el tensor de tensiones son

$$\frac{\partial \rho k_1}{\partial x_1} + \rho k_j = \rho \frac{dv_i}{dt}$$

en la situación estática y sin fuerzas externas, se reducen a  $\partial\sigma_{ij}/\partial x_j = 0$ , que en el caso plano

$$\frac{\partial\sigma_{11}}{\partial x_1} + \frac{\partial\sigma_{12}}{\partial x_2} = 0, \quad \frac{\partial\sigma_{21}}{\partial x_1} + \frac{\partial\sigma_{22}}{\partial x_2} = 0$$

La primera se reduce a la existencia de una función arbitraria  $\phi_1$ , tal que  $\sigma_{11} = \partial\phi_1/\partial x_2$ ,  $\sigma_{12} = -\partial\phi_1/\partial x_1$ , y la segunda a la existencia de una  $\phi_2$ , tal que  $\sigma_{21} = \partial\phi_2/\partial x_2$ ,  $\sigma_{22} = -\partial\phi_2/\partial x_1$ , y la simetría del tensor hace que estas dos funciones no sean independientes sino que cumplan  $\partial\phi_1/\partial x_1 + \partial\phi_2/\partial x_2 = 0$ , lo cual se satisface si existe una  $\phi$  tal que  $\phi_1 = \partial\phi/\partial x_2$  y  $\phi_2 = -\partial\phi/\partial x_1$ .

Las condiciones de compatibilidad del tensor de deformaciones se reducen a

$$\frac{\partial^2 e_{11}}{\partial x_2^2} + \frac{\partial^2 e_{22}}{\partial x_1^2} = 2 \frac{\partial^2 e_{12}}{\partial x_1 \partial x_2}, \quad \frac{\partial^2 e_{33}}{\partial x_1^2} = \frac{\partial^2 e_{33}}{\partial x_2^2} = 0$$

La tercera componente  $e_{33} = ax_1x_2 + bx_1 + cx_2 + d$ . Y para el tensor de tensiones, supuestas constantes o nulas las fuerzas másicas, las condiciones de compatibilidad quedan

$$\nabla^2(\sigma_{11} + \sigma_{22}) = 0$$

y para cualquier función de Airy que resuelve cualquier problema de tensiones planas, a

$$\phi_{,1111} + \phi_{,2222} + 2\phi_{,1122} = 0$$

En medios anisótropos pero con simetría cristalina, la simetría de la red hace que no todos los coeficientes del tensor elástico sean diferentes. Por ejemplo, en el caso de una red con simetría cúbica, los átomos próximos están separados una misma distancia  $a$  y los únicos coeficientes diferentes son los  $C_{xxxx}$ ,  $C_{xxyy}$  y  $C_{xyxy}$ , y donde estos dos últimos son aproximadamente iguales. En el caso isótropo, la invariancia por rotación establece que  $C_{xxxx} = C_{xxyy} + 2C_{xyxy}$ , como puede verificarse y reduce a dos constantes la caracterización del tensor elástico.

# Capítulo 4

## Introducción a la Formulación Lagrangiana y Hamiltoniana para Sistemas Continuos

Hay algunos problemas de la mecánica que implican sistemas continuos, como, el problema de un sólido elástico vibrante. Aquí cada punto del sólido continuo participa en las oscilaciones, y el movimiento completo puede ser descrito solamente especificando las coordenadas de posición de todos los puntos. No es difícil modificar las formulaciones de la mecánica clásica para manejar tales problemas.

### 4.1 Transición de un sistema discreto a uno continuo

Aplicaremos este procedimiento a una barra elástica infinitamente larga que pueda experimentar pequeñas vibraciones longitudinales, es decir, desplazamientos oscilatorios de las partículas de la barra paralela al eje sobre la barra. Un sistema integrado por partículas discretas se aproxima a la barra continua en una cadena infinita de puntos totales igualmente espaciados por una distancia de separación  $a$  y conectados por los resortes sin masa y uniformes que tienen constante de fuerza  $k$  (figura 4.1). Será asumido que los puntos totales pueden moverse solamente a lo largo de la longitud de la cadena. El sistema discreto será reconocido como extensión de la molécula poliatómica lineal. Podemos por lo tanto obtener las ecuaciones que describen el movimiento por las técnicas acostumbradas para pequeñas oscilaciones.

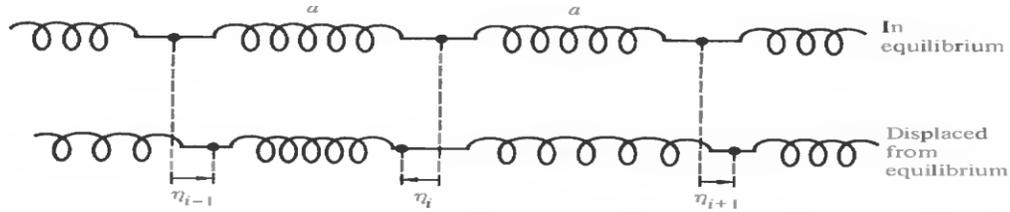


Figura 4.1 Un sistema discreto de puntos de masa igual conectadas por resortes, como una aproximación a una barra elástica continua.

Denotemos el desplazamiento de la partícula  $i$ -ésima de su posición de equilibrio por  $\eta_i$ . La energía cinética es

$$T = \frac{1}{2} \sum_i m \dot{\eta}_i^2 \quad (56)$$

Donde  $m$  es la masa de cada partícula. La energía potencial correspondiente es la suma de las energías potenciales de cada resorte como resultado de ser estirado o comprimido de su posición de equilibrio

$$V = \frac{1}{2} \sum_i k (\eta_{i+1} - \eta_i)^2 \quad (57)$$

Combinando las ecuaciones (56) y (57), el Lagrangiano del sistema es

$$L = T - V = \frac{1}{2} \sum_i [m \dot{\eta}_i^2 - k (\eta_{i+1} - \eta_i)^2] \quad (58)$$

la cual puede ser escrita como

$$L = \frac{1}{2} \sum_i a \left[ \frac{m}{a} \dot{\eta}_i^2 - ka \left( \frac{\eta_{i+1} - \eta_i}{a} \right)^2 \right] = \sum_i a L_i \quad (59)$$

donde  $a$  es la separación de equilibrio entre los puntos (figura 4.1). Las ecuaciones de movimiento de Lagrange resultantes para las coordenadas  $\eta_i$  son

$$\frac{m}{a} \ddot{\eta}_i - ka \left( \frac{\eta_{i+1} - \eta_i}{a^2} \right) + ka \left( \frac{\eta_i - \eta_{i-1}}{a^2} \right) = 0 \quad (60)$$

El caso de una barra continua se obtiene a partir de la forma particular de  $L$  en Eq. (59), se trata del límite en el que la distancia entre las masas tiende a cero. Está claro que  $m/a$  se reduce a  $\mu$ , la masa por unidad de longitud del sistema continuo, pero el valor límite de  $ka$  puede no ser tan obvio. Para una barra elástica que obedece la ley de Hooke, recordado que la extensión de la

barra por unidad de longitud es directamente proporcional a la fuerza o a la tensión ejercida en la barra. Esta relación se puede escribir como

$$F = Y\xi$$

Donde  $\xi$  es el alargamiento por unidad de longitud y  $Y$  es el módulo de Young. Ahora la extensión de la longitud  $\mathbf{a}$  de un sistema discreto, por unidad de longitud, será  $\xi = (\eta_{i+1} - \eta_i)/\mathbf{a}$ . La fuerza necesaria para estirar el resorte por esta cantidad es

$$F = k(\eta_{i+1} - \eta_i) = ka \left( \frac{\eta_{i+1} - \eta_i}{a} \right)$$

de modo que  $\mathbf{ka}$  deba corresponder al módulo de Young de la barra continua. Al pasar del caso discreto al caso continuo, el índice  $i$  del número entero que identifica el punto total particular se convierte en la coordenada de posición continua  $x$ ; en vez de la variable  $\eta_i$  tenemos  $\eta(x)$ . Además, la cantidad

$$\frac{\eta_{i+1} - \eta_i}{a} = \frac{\eta(x+a) - \eta(x)}{a}$$

La fracción  $\frac{\eta(x+a) - \eta(x)}{a}$  tiende a la derivada

$$\frac{d\eta}{dx}$$

como  $\mathbf{a}$ , juega el papel de  $dx$ , se acerca al cero. Finalmente, la adición sobre un número discreto de partículas se realiza una integral sobre  $x$ , la longitud de la barra y el Lagrangiano (59) aparecen como

$$L = \frac{1}{2} \int \left[ \mu \dot{\eta}_i^2 - Y \left( \frac{d\eta}{dx} \right)^2 \right] dx \quad (61)$$

En el límite como  $\mathbf{a}$  tiende a cero, los dos últimos términos en la ecuación de movimiento (60) se hacen

$$\lim_{a \rightarrow 0} -\frac{Y}{a} \left[ \left( \frac{d\eta}{dx} \right)_x - \left( \frac{d\eta}{dx} \right)_{x \rightarrow a} \right]$$

que claramente define una segunda derivada de  $\eta$ . De ahí, la ecuación de movimiento para la barra continua elástica es

$$\mu \frac{d^2\eta}{dt^2} - Y \frac{d^2\eta}{dx^2} = 0 \quad (62)$$

la familiar ecuación de onda en una dimensión con velocidad de propagación es

$$v = \sqrt{\frac{Y}{\mu}} \quad (63)$$

La ecuación (63) es la fórmula conocida para la velocidad de las ondas longitudinales elásticas.

Este ejemplo simple es suficiente para ilustrar los rasgos sobresalientes de la transición de un sistema discreto a un sistema continuo. El hecho más importante para comprender es el papel jugado por la coordenada de posición  $x$ . Esta no es una coordenada generalizada; esto sirve simplemente como un índice continuo que substituye al discreto  $i$ . Tal que cada valor de  $i$  corresponde a una de las diferentes coordenadas generalizadas,  $\eta_i$ , del sistema, así que para cada valor de  $x$  hay una coordenada generalizada  $\eta(x)$ . Ya que la  $\eta$  depende también de la variable continua  $t$ , nosotros quizás deberíamos escribir con más exactitud  $\eta(x,t)$ , indicando que  $x$ , como  $t$ , pueden ser considerados como un parámetro que está dentro del Lagrangiano. Si el sistema continuo fuera tridimensional, en lugar de unidimensional, las coordenadas generalizadas serían distinguidas por tres índices continuos  $x$ ,  $y$ , y  $z$  serían escritas como  $\eta(x,y,z,t)$ . Note que las cantidades  $x$ ,  $y$ ,  $z$ , y  $t$  son completamente independientes uno del otro, y aparecen sólo como variables explícitas en  $\eta$ . Las derivadas de  $\eta$  en lo que concierne a cualquiera de ellas siempre pueden ser escritas como derivadas totales sin ambigüedad. La Ecuación (61) también muestra que el Lagrangiano aparece como una integral sobre el índice continuo  $x$ ; en el caso correspondiente tridimensional el Lagrangiano tendría la forma

$$L = \iiint \mathcal{L} \, dx dy dz \quad (64)$$

Donde a  $\mathcal{L}$  se le conoce como la densidad Lagrangiana. Para las vibraciones longitudinales de la barra continua la densidad Lagrangiana es

$$\mathcal{L} = \frac{1}{2} \left[ \mu \left( \frac{d\eta}{dt} \right)^2 - Y \left( \frac{d\eta}{dx} \right)^2 \right] \quad (65)$$

correspondiente al límite continuo de la cantidad  $L_i$ , que aparece en la ecuación (59). La densidad Lagrangiana, en lugar del Lagrangiano misma, será usada para describir el movimiento del sistema.

## 4.2 Formulación de Lagrange para sistemas continuos

Nótese de la ecuación (64) que  $\mathcal{L}$  para la barra elástica, además de ser una función de  $\dot{\eta} = \partial\eta/\partial t$ , también implica una derivada espacial de  $\eta$ , a saber,  $\partial\eta/\partial x$ ;  $x$  y  $t$  así juegan un papel similar como los parámetros en la densidad Lagrangiana. Si hubiera presente fuerzas locales además de las interacciones con los vecinos más cercanos, entonces  $\mathcal{L}$  sería una función de  $\eta$  así como del gradiente espacial de  $\eta$ . Desde luego, en el caso general  $\mathcal{L}$  bien podría ser una función explícita de  $x$  y también de  $t$ . Entonces la densidad Lagrangiana para cualquier sistema unidimensional continuo aparecería como una función de la forma

$$\mathcal{L} = \mathcal{L}\left(\eta, \frac{d\eta}{dx}, \frac{d\eta}{dt}, x, t\right) \quad (66)$$

El Lagrangiano total, después de la ecuación (65), es entonces la integral de  $\mathcal{L}$  sobre el rango de las  $x$  definidos por el sistema, y el principio de Hamilton, en el límite del sistema continuo aparece como

$$\delta I = \delta \int_1^2 \int \mathcal{L} dx dt = 0 \quad (67)$$

Si el principio de Hamilton para el sistema continuo tiene solución, debe ser posible sacar el límite continuo de la ecuación de movimiento, por ejemplo de la ecuación (62), directamente por variación de la doble integral de  $\mathcal{L}$  en la ecuación (67). Podemos realizar esta variación por los métodos que se diferencian sólo ligeramente de aquellos para un sistema discreto. La variación es sólo sobre  $\eta$  y sus derivadas; los parámetros  $x$  y  $t$  no son afectados por la variación directamente o en el rango de integración. Tal como la variación de  $\eta$  es cero al final en los puntos  $t_1$  y  $t_2$ , entonces la variación de  $\eta$  en los límites  $x_1$  y  $x_2$  de la integración en  $x$  debe también ser cero. Un camino de variación de integración conveniente en el espacio  $\eta$  puede ser obtenido, por ejemplo, escogiendo  $\eta$  de una familia de un parámetro de funciones de  $\eta$  posibles:

$$\eta(x, t; \alpha) = \eta(x, t; 0) + \alpha \zeta(x, t) \quad (68)$$

Aquí  $\eta(\mathbf{x}, \mathbf{t}; \alpha)$  significa la función que satisfará el principio de Hamilton, y la  $\zeta$  es cualquier función que desaparece en los puntos finales de  $\mathbf{t}$  y  $\mathbf{x}$ . Si  $I$  es considerado como una función de  $\alpha$ , es un extremo para  $\eta(\mathbf{x}, \mathbf{t}; \alpha)$  la derivada de  $I$  con respecto a  $\alpha$  desaparece en  $\alpha = 0$ . Por diferenciación directa.

$$\frac{dI}{d\alpha} = \int_{t_1}^{t_2} \int_{x_1}^{x_2} dxdt \left[ \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \eta} \frac{\partial \eta}{\partial \alpha} + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \frac{d\eta}{dt}} \frac{\partial}{\partial \alpha} + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \frac{d\eta}{dx}} \frac{\partial}{\partial \alpha} \left( \frac{d\eta}{dx} \right) \right] \quad (69)$$

Como la variación de  $\eta$ , es decir,  $\alpha\zeta$  desaparece en los puntos finales, la integración por partes de  $\mathbf{x}$  y  $\mathbf{t}$  cede las relaciones

$$\int_{t_1}^{t_2} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \frac{d\eta}{dt}} \frac{\partial}{\partial \alpha} \left( \frac{d\eta}{dt} \right) dt = - \int_{t_1}^{t_2} \frac{d}{dt} \left( \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \frac{d\eta}{dt}} \right) \frac{\partial \eta}{\partial \alpha} dt$$

y

$$\int_{x_1}^{x_2} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \frac{d\eta}{dx}} \frac{\partial}{\partial \alpha} \left( \frac{d\eta}{dx} \right) dx = - \int_{x_1}^{x_2} \frac{d}{dx} \left( \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \frac{d\eta}{dx}} \right) \frac{\partial \eta}{\partial \alpha} dx$$

El principio de Hamilton por lo tanto puede ser escrito como

$$\int_{t_1}^{t_2} \int_{x_1}^{x_2} dxdt \left[ \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \eta} - \frac{d}{dt} \left( \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \frac{d\eta}{dt}} \right) - \frac{d}{dx} \left( \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \frac{d\eta}{dx}} \right) \right] \left( \frac{\partial \eta}{\partial \alpha} \right)_0 = 0 \quad (70)$$

la naturaleza arbitraria de la variación del camino implica la desaparición de la expresión en los paréntesis:

$$\frac{d}{dt} \left( \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \frac{d\eta}{dt}} \right) + \frac{d}{dx} \left( \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \frac{d\eta}{dx}} \right) - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \eta} = 0 \quad (71)$$

Las ecuaciones de Euler-Lagrange (71) es la forma apropiada de la ecuación de movimiento que sale del principio de Hamilton, (67).

Un sistema de  $n$  grados discretos de libertad tendrá  $n$  ecuaciones de Lagrange de movimiento; para el sistema continuo con un número infinito de los grados de libertad parecemos obtener sólo una ecuación de Lagrange. La ecuación de movimiento para  $\eta$  es una ecuación diferencial que implica sólo el tiempo, y en aquel sentido que en la Eq. (70) proporciona una ecuación separada de movimiento para cada valor de  $\mathbf{x}$ . La naturaleza continua de los índices  $\mathbf{x}$  aparece en la Eq. (70) es una ecuación diferencial parcial en las dos

variables  $x$  y  $t$ , cediendo  $\eta$  como  $\eta(x, t)$ . Para el caso específico de vibraciones longitudinales en una barra elástica, es visto en la forma de la densidad Lagrangiana. Eq. (65), esto es

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \frac{d\eta}{dt}} = \mu \frac{d\eta}{dt}, \quad \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \frac{d\eta}{dx}} = -Y \frac{d\eta}{dx}, \quad \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \eta} = 0$$

Así, como deseamos, la Eq. (71), se reduce correctamente a la ecuación de movimiento. Eq. (62).

La formulación Lagrangiana desarrollada aquí para sistemas unidimensionales continuos tiene obviamente que ser ampliada a dos - y tres dimensiones, por ejemplo un sólido elástico general. Mejor aún, en vez de una  $\eta$  para especificar el campo puede haber varios: por ejemplo, el desplazamiento de una posición de equilibrio sería descrito por un vector espacial  $\boldsymbol{\eta}$  con tres componentes. No hay ninguna dificultad en realizar los pasos matemáticos para una situación general en el paralelismo cercano al caso unidimensional de una componente. Sin embargo, las fórmulas se hacen muy largas e incómodas para escribirlas de la misma manera, sobre todo las dos primeras derivadas. El beneficio considerable en la simplicidad de escritura puede ser alcanzado por notar que la  $t$  del tiempo y las coordenadas espaciales  $x$ ,  $y$ , y  $z$  juega el mismo papel matemático en el principio de Hamilton. Las cantidades del campo son las funciones de las coordenadas tanto del tiempo como del espacio que deben ser tratados como variables independientes. No hay variación de las cantidades del campo en los límites de integración en el principio de Hamilton tanto del tiempo como del espacio.

### 4.3 Formulación de Hamilton para medios continuos

Es posible obtener una formulación hamiltoniana para sistemas continuos de coordenadas. Para indicar el método de aproximación, consideremos una cadena lineal de masa. Relacionando a cada componente de campo,  $\eta_i$ , con un ímpetu canónico

$$p_i = \frac{\partial L}{\partial \dot{\eta}_i} = a \frac{\partial L_i}{\partial \dot{\eta}_i} \quad (72)$$

El hamiltoniano para el sistema es por lo tanto

$$H = p_i \dot{\eta}_i - L = a \frac{\partial L_i}{\partial \dot{\eta}_i} - L$$

o

$$H = a \left( \frac{\partial L_i}{\partial \dot{\eta}_i} \dot{\eta}_i - L \right) \quad (73)$$

Recordamos que en el límite de la barra continua, cuando  $a$  tiende a cero,  $L_i \rightarrow \mathcal{L}$  y la suma en la Eq. (73) se transforma en la integral:

$$H = \int dx \left( \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\eta}_i} \dot{\eta}_i - \mathcal{L} \right) \quad (74)$$

Los momentos individuales canónicos  $p_i$ , dados por la Eq. (72), desaparecen en el límite continuo, pero podemos definir una densidad de ímpetu,  $\pi$ , que permanece finita:

$$\lim_{a \rightarrow 0} \frac{p_i}{a} \equiv \pi = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\eta}} \quad (75)$$

La Ecuación (74) es una forma de un espacio integral sobre una densidad hamiltoniana,  $\mathcal{H}$ , definida por

$$\mathcal{H} = \pi \dot{\eta} - \mathcal{L} \quad (76)$$

Aun cuando se pueda introducir así una formulación de Hamilton de manera directa para campos clásicos, nos damos cuenta de que el procedimiento singulariza la variable tiempo a la que habrá que darle un tratamiento especial. Es por eso que contrasta con el desarrollo que hemos dado para la formulación lagrangiana en el cual se trataban simétricamente las variables independientes tiempo y espaciales.

# Capítulo 5

## Aplicación al cristal liquido colestérico

### 5.1 Energía elástica de Frank y Oseen

Para especificar la orientación de la molécula usaremos  $\hat{n} = \hat{n}(\vec{x})$ , tal que  $\hat{n} \cdot \hat{n} = 1$ , representa el alineamiento del CL (Cristal Liquido). Siendo esta una posición a la cual regresan las moléculas alargadas de este material después de cada perturbación, es de suponerse la existencia de alguna energía elástica presente debido a que se traduce en trabajo al mover a la molécula organizadamente, debe tratarse de energía libre.

Si el número de partículas no cambia, entonces estamos hablando de la energía libre de Helmholtz. Denotémosla con el símbolo  $W$ , entonces

$$W = \int_V w(\hat{n}, \nabla \hat{n}) dV \quad (77)$$

donde  $w(\hat{n}, \nabla \hat{n}) \equiv$  densidad de energía libre.

Cuando el CL se encuentra libre de esfuerzo externo se dice que toma una orientación o configuración natural de sus moléculas. Tomamos el origen de  $w$  como

$$w = 0$$

cuando el CL se encuentra en la orientación natural tendremos

$$w(\hat{n}, \nabla \hat{n}) \geq 0$$

Nos fijamos en una orientación y lo mismo ocurre para cualquiera de las posiciones siguientes:

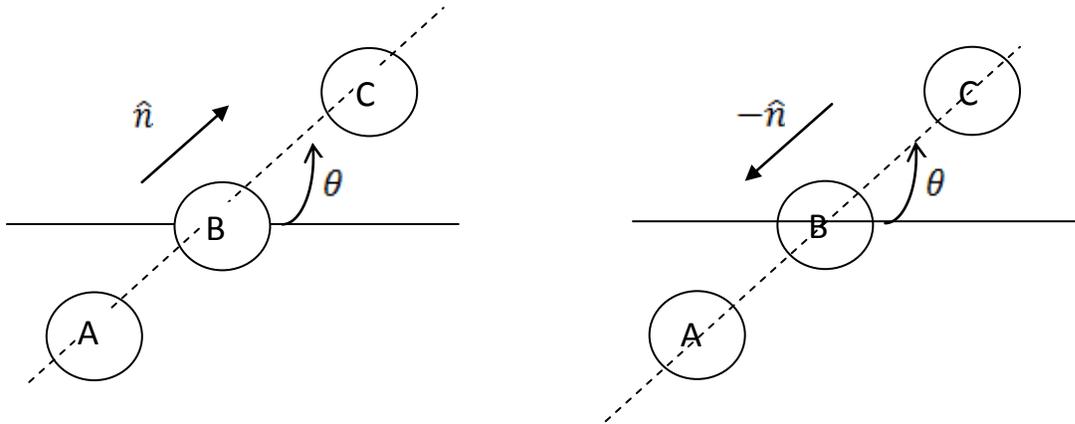


Figura 5.1 Esquema de la orientación del vector director en la molécula del CL.

de modo que es lo mismo  $\hat{n}$  que  $-\hat{n}$ , es decir, ambas posiciones son físicamente indistinguibles por lo tanto

$$w(\hat{n}, \nabla \hat{n}) = w(-\hat{n}, -\nabla \hat{n})$$

Además por la forma del movimiento se tiene que es invariante bajo rotaciones, es decir, no depende de la selección de la orientación de ejes coordenados. Por eso, sea

$$Q \equiv \text{matriz ortogonal propia (de rotaciones)}$$

debe cumplirse que

$$w(\hat{n}, \nabla \hat{n}) = w(Q\hat{n}, Q\nabla \hat{n}Q^T)$$

donde  $Q^T$  es la traspuesta de  $Q$ .

Consideremos un CL nemático y seleccionemos un sistema de coordenadas tal que

$$\hat{n}_0 = (0,0,1)$$

con  $\Delta x, \Delta y, \Delta z$  los cambios en orientación respecto a los ejes  $x, y, z$  respectivamente.

Las combinaciones posibles de  $\hat{n}$  con  $\nabla$  son

$$\nabla \cdot \hat{n} \quad (78)$$

$$\nabla \times \hat{n} \quad (79)$$

$$\hat{n} \cdot \nabla \quad (80)$$

$$\hat{n} \cdot \nabla x \quad (81)$$

Claramente (80) y (81) son operadores que tienen que actuar sobre  $\hat{n}$  o sobre  $\nabla \hat{n}$ , pero consideramos únicamente el primero porque el segundo involucra segundas derivadas, que pueden ser llevados a primeras derivadas si se integra por partes.

Entonces nos quedamos con

$$\hat{n} \cdot \nabla \hat{n} \quad (80a)$$

$$\hat{n} \cdot \nabla \times \hat{n} \quad (81a)$$

Hay simetría  $\hat{n} \rightarrow -\hat{n}$  y localmente hay simetría  $\hat{x} \rightarrow \hat{x}$ , lo cual implica que debe haber simetría  $\nabla \rightarrow -\nabla$ . Entonces de (78) resulta

$$(\nabla \cdot \hat{n})^2 \quad (82)$$

El término

$$(\nabla \times \hat{n})^2 \quad (83)$$

no aparece en la densidad de energía

De (80) se construye

$$[(\hat{n} \cdot \nabla) \hat{n}]^2 \quad (84)$$

De (81) se construye

$$[\hat{n} \cdot \nabla \times \hat{n}]^2 \quad (85)$$

Una combinación lineal de (82), (84), y (85) produce

$$F = F_0 + a_1(\nabla \cdot \hat{n})^2 + a_2[\hat{n} \cdot \nabla \times \hat{n}]^2 + a_3[(\hat{n} \cdot \nabla)\hat{n}]^2 \quad (86)$$

El término

$$\hat{n} \cdot \nabla \times \hat{n} \quad (87)$$

no se incluye porque en el cálculo de Gibbs  $\hat{n} \cdot \nabla \times \hat{n}$  es clasificado como un pseudoescalar. Eso implicaría que para agregarlo a la expresión (86) necesitamos multiplicarlo por un pseudoescalar  $b$ , sin embargo, cuando hay simetría con respecto a algún plano, como es el caso de los nemáticos, una reflexión respecto a dicho plano produce el cambio:  $b \rightarrow -b$ , lo cual rompe la simetría de  $F$ .

En el caso de un colestérico si se puede incluir el término  $\hat{n} \cdot \nabla \times \hat{n}$ . Empecemos por desarrollar la siguiente expresión

$$(\hat{n} \cdot \nabla \times \hat{n} + q_0)^2 = [\hat{n} \cdot \nabla \times \hat{n}]^2 + 2q_0\hat{n} \cdot (\nabla \times \hat{n}) + q_0^2 \quad (88)$$

En esta última relación se genera un término como el tercero de la ecuación (86) más el que se pretende incluir. Considerando que  $q_0^2$  puede ser absorbido en  $F_0$ , tratando el sistema físico que consiste de un CL colestérico que se encuentra bajo la acción de un campo eléctrico, el cual representa el término  $q_0$ , proponemos entonces para colestéricos:

$$F = F_0 + a_1(\nabla \cdot \hat{n})^2 + a_2[\hat{n} \cdot \nabla \times \hat{n} + q_0]^2 + a_3[(\hat{n} \cdot \nabla)\hat{n}]^2 \quad (89)$$

Para el caso en equilibrio, tenemos que las relaciones toman la forma

$$\nabla \cdot \hat{n} = 0, \quad \hat{n} \cdot \nabla \times \hat{n} = -q_0, \quad (\hat{n} \cdot \nabla)\hat{n} = 0$$

Su solución es

$$n_x = 0, \quad n_y = \cos q_0 x, \quad n_z = \sin q_0 x$$

## 5.2 Ecuación de configuración del Colestérico

En esta sección vamos a estudiar un sistema formado por un cristal líquido colestérico encerrado en una caja de paredes planas y forma de prisma cuadrangular, tal que el eje del colestérico se encuentra orientado en forma perpendicular a dos de las paredes del recipiente, Además, se supone la presencia de un dispositivo útil para aplicar sobre el colestérico un campo electrostático uniforme, que apunta en forma perpendicular al eje mencionado. Como se verá, la configuración del colestérico varía con la magnitud de este campo y vamos a deducir la ecuación que nos describe los cambios en la configuración que presenta el cristal líquido colestérico cuando se encuentra en presencia de éste campo eléctrico uniforme.

Partimos de la función de Helmholtz que obtuvimos en la sección anterior e incorporamos la contribución debida al campo eléctrico en la densidad de energía libre.

En lugar de la densidad lagrangiana, utilizaremos la expresión para la energía libre total como nuestra función en las ecuaciones de Euler - Lagrange de medios continuos, obteniendo finalmente la ecuación diferencial que nos provee la información sobre el estado en la configuración en la orientación molecular.

La selección del sistema de coordenadas se presenta en la figura 5.2:

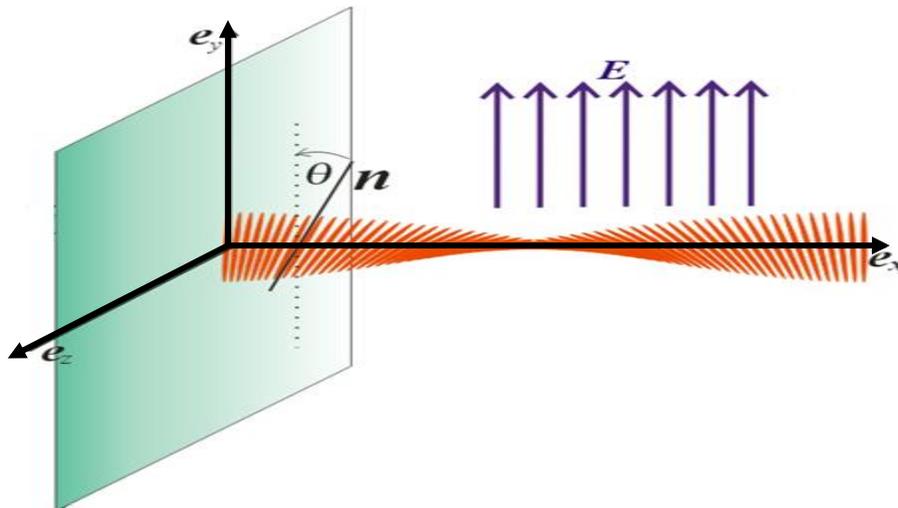


Figura 5.2 Estructura de un CL colestérico en el espacio coordenado en presencia de un campo eléctrico uniforme perpendicular a su eje de orientación.

La orientación, sin presencia del campo, del vector director, es:

$$\hat{n} = (0, \sin \theta, \cos \theta) \quad (90)$$

$$\theta = \theta(x) \quad (91)$$

La energía libre del sistema está dada como sigue:

$$F_{el} = \frac{1}{2} \int_V [k_1 (\nabla \cdot \hat{n})^2 + k_2 (\hat{n} \cdot \nabla \times \hat{n} - q)^2 + k_3 (\hat{n} \times \nabla \times \hat{n})^2] dV \quad (92)$$

Haciendo los cálculos indicados en la expresión (92), resulta:

$$\nabla \cdot \hat{n} = 0 + \frac{\partial \sin \theta}{\partial y} + \frac{\partial \cos \theta}{\partial z} = 0 \quad (93)$$

$$\nabla \times \hat{n} = \begin{vmatrix} \hat{i} & \hat{j} & \hat{k} \\ \partial_x & \partial_y & \partial_z \\ 0 & \sin \theta & \cos \theta \end{vmatrix} = \hat{i}(0) + \hat{j} \left( 0 + \frac{d\theta}{dx} \sin \theta \right) + \hat{k} \left( \frac{d\theta}{dx} \cos \theta \right) \quad (94)$$

$$\hat{n} \cdot (\nabla \times \hat{n}) = (0, \sin \theta, \cos \theta) \cdot \left( 0, \frac{d\theta}{dx} \sin \theta, \frac{d\theta}{dx} \cos \theta \right) = \frac{d\theta}{dx} \quad (95)$$

$$\hat{n} \times \nabla \times \hat{n} = \begin{vmatrix} \hat{i} & \hat{j} & \hat{k} \\ 0 & \sin \theta & \cos \theta \\ 0 & \frac{d\theta}{dx} \sin \theta & \frac{d\theta}{dx} \cos \theta \end{vmatrix} = \hat{i}(0) + \hat{j}(0) + \hat{k}(0) \quad (96)$$

En (92)

$$F_{el} = \frac{1}{2} \int_V k_2 \left( \frac{d\theta}{dx} - q \right)^2 dV \quad (97)$$

$$f_{el} \equiv \text{densidad de energía libre} = \frac{k_2}{2} \left( \frac{d\theta}{dx} - q \right)^2 \quad (98)$$

Considerando  $\vec{E} = (0, E, 0)$

Parte eléctrica

$$\frac{1}{2} \int \vec{D} \cdot \vec{E} dV = F_{em} \quad (99)$$

con

$$\vec{D} = \vec{\epsilon} \vec{E} = \epsilon_{ij} E_j \quad (100)$$

$$\epsilon_{ij} = \epsilon_{\perp} \delta_{ij} - \epsilon_a n_i n_j \quad (101)$$

Calculando  $(0, \sin \theta, \cos \theta) \otimes (0, \sin \theta, \cos \theta) \Rightarrow$

$$n_i n_j = \begin{bmatrix} n_x n_x & n_x n_y & n_x n_z \\ n_y n_x & n_y n_y & n_y n_z \\ n_z n_x & n_z n_y & n_z n_z \end{bmatrix} \quad (102)$$

$$n_i n_j = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & \sin^2 \theta & \sin \theta \cos \theta \\ 0 & \sin \theta \cos \theta & \cos^2 \theta \end{bmatrix} \quad (103)$$

$$\epsilon_{ij} = \begin{bmatrix} \epsilon_{\perp} & 0 & 0 \\ 0 & \epsilon_{\perp} - \epsilon_a \sin^2 \theta & \epsilon_a \sin \theta \cos \theta \\ 0 & \epsilon_a \sin \theta \cos \theta & \epsilon_{\perp} - \epsilon_a \cos^2 \theta \end{bmatrix} \quad (104)$$

$$\epsilon_{ij} E_j = (\epsilon_{\perp} - \epsilon_a \sin^2 \theta) E \hat{j} + \epsilon_a E \sin \theta \cos \theta \hat{k} = \vec{D} \quad (105)$$

$$\vec{D} \cdot \vec{E} = (\epsilon_{\perp} - \epsilon_a \sin^2 \theta) E^2 \quad (106)$$

luego

$$f_{em} = \frac{1}{2} (\epsilon_{\perp} - \epsilon_a \sin^2 \theta) E^2 \quad (107)$$

La densidad de energía libre total

$$f = f_{el} + f_{em} \quad (108)$$

$$f = \frac{k_2}{2} \left( \frac{d\theta}{dx} - q \right)^2 + \frac{E^2}{2} (\varepsilon_{\perp} - \varepsilon_a \sin^2 \theta) \quad (109)$$

Ecuación de Lagrange

$$\frac{d}{dx} \left[ \frac{\partial f}{\partial \left( \frac{d\theta}{dx} \right)} \right] - \frac{\partial f}{\partial \theta} = 0 \quad (110)$$

$$\frac{\partial f}{\partial \left( \frac{d\theta}{dx} \right)} = k_2 \left( \frac{d\theta}{dx} - q \right) \Rightarrow$$

$$\frac{d}{dx} \frac{\partial f}{\partial \left( \frac{d\theta}{dx} \right)} = k_2 \frac{d^2 \theta}{dx^2} \quad (111)$$

$$\frac{\partial f}{\partial \theta} = -\frac{E^2}{2} \varepsilon_a \sin \theta \cos \theta = -\varepsilon_a E^2 \sin \theta \cos \theta \quad (112)$$

Sustituyendo la ecuación (111) y (112) en (110):

$$k_2 \frac{d^2 \theta}{dx^2} + \varepsilon_a E^2 \sin \theta \cos \theta = 0$$

en forma completa

$$\frac{d^2 \theta}{dx^2} + \frac{\varepsilon_a E^2}{k_2} \sin \theta \cos \theta = 0 \quad (113)$$

La ecuación (113) describe la configuración del cristal líquido colestérico bajo la acción de un campo eléctrico uniforme orientado en forma perpendicular al eje del CL. Como se ve enseguida, es matemáticamente idéntica a la ecuación diferencial que describe la evolución de la orientación de un péndulo plano cuya amplitud de oscilación no está restringida a oscilaciones pequeñas, haciendo  $\theta = \varphi/2$ , y de la identidad  $\sin 2\alpha = 2 \sin \alpha \cos \alpha$  resulta:

$$\sin 2 \frac{\varphi}{2} = 2 \sin \frac{\varphi}{2} \cos \frac{\varphi}{2}$$

$$\frac{d^2\varphi}{dx^2} + \frac{\varepsilon_a E^2}{k_2} \sin \varphi = 0 \quad (114)$$

Los parámetros que caracterizan al sistema formado por el colestérico encerrado dentro de una caja con forma de prisma cuadrangular y un campo electrostático aplicado están en el coeficiente del seno del ángulo.

Cuando el campo electrostático es cero, queda solamente el primer término, de donde resulta que el ángulo variará linealmente con  $x$ , de tal modo que en una gráfica del ángulo respecto a  $x$  resulta una recta.

Vamos a considerar la ecuación diferencial del colestérico, que nos describe la configuración y llevarla a una forma de una primera integral, entonces

$$\frac{d^2\varphi}{dx^2} + \frac{\varepsilon_a E^2}{k_2} \sin \varphi = 0$$

Para simplificar la notación denotemos a  $\frac{d^2\varphi}{dx^2} = \ddot{\varphi}$ , y multiplicamos por  $\dot{\varphi}$

$$\dot{\varphi}\ddot{\varphi} + \frac{\varepsilon_a E^2}{k_2} \dot{\varphi} \sin \varphi = 0$$

$$\frac{1}{2} \frac{d\dot{\varphi}^2}{dx} - \frac{\varepsilon_a E^2}{k_2} \frac{d}{dx} \cos \varphi = 0$$

$$\frac{d}{dx} \left[ \dot{\varphi}^2 - \frac{2\varepsilon_a E^2}{k_2} \cos \varphi \right] = 0$$

$$\dot{\varphi}^2 - \frac{2\varepsilon_a E^2}{k_2} \cos \varphi = K = \text{constante}$$

Sea  $K = 1$  la constante, entonces

$$\dot{\varphi}^2 = 1 + \frac{2\varepsilon_a E^2}{k_2} \cos \varphi$$

$$\frac{d\varphi}{dx} = \left[ 1 + \frac{2\varepsilon_a E^2}{k_2} \cos \varphi \right]^{1/2} \quad (115)$$

Sea  $b = \frac{2\varepsilon_a E^2}{k_2}$ , entonces la ecuación

$$\frac{d\varphi}{dx} = [1 + b \cos \varphi]^{1/2}$$

Considerando que  $\cos \varphi = 1 - 2 \sin^2 \frac{\varphi}{2}$ , entonces

$$\frac{d\varphi}{dx} = (1 + b)^{1/2} \left[ 1 - \frac{2b}{1 + b} \sin^2 \frac{\varphi}{2} \right]^{1/2}$$

Sea  $\vartheta = \frac{\varphi}{2}$ ,  $2 \frac{d\vartheta}{dx} = \frac{d\varphi}{dx}$  y  $\lambda = \frac{2b}{1+b}$ , entonces

$$2 \frac{d\vartheta}{dx} = (1 + b)^{1/2} [1 - \lambda \sin^2 \vartheta]^{1/2}$$

sea  $\xi = \frac{(1+b)^{1/2}}{2} x$ , finalmente la ecuación diferencial para el CL colestérico toma la forma

$$\frac{d\vartheta}{d\xi} = [1 - \lambda \sin^2 \vartheta]^{1/2} \quad (116)$$

Esta es la forma de la primera integral de la ecuación diferencial de segundo orden que describe el ordenamiento en la configuración del CL colestérico confinado en una región rectangular en presencia de un campo eléctrico perpendicular al eje de simetría del CL colestérico.

# Capítulo 6

## Teoría del péndulo

Para comparar con la descripción matemática de la configuración del sistema de cristal líquido colestérico que se encuentra bajo la acción de un campo electrostático uniforme, en ésta sección vamos a formalizar el problema del péndulo simple, encontraremos las ecuaciones diferenciales que detallan el movimiento de la lenteja cuando se mueve en el plano. En la primera sección vamos utilizar la formulación Lagrangiana para deducir la ecuación de movimiento. Después presentamos la deducción de las ecuaciones canónicas de movimiento mediante la función Hamiltoniana, estos resultados son los que utilizaremos en el programa que nos generará la representación gráfica a la solución del problema.

### 6.1 Péndulo Simple (Lagrange)

En mecánica clásica la función Lagrangiana de un sistema conservativo, denotada mediante  $L$ , es simplemente la diferencia entre su energía cinética,  $T$ , y su energía potencial,  $U$ . El dominio apropiado del Lagrangiano es un espacio de fases, y debe obedecer las **ecuaciones de Euler-Lagrange**. En coordenadas generalizadas este Lagrangiano toma usualmente la forma:

$$L(q_i, \dot{q}_i) = \frac{m}{2} \dot{q}_i^2 - V(q_i; t)$$

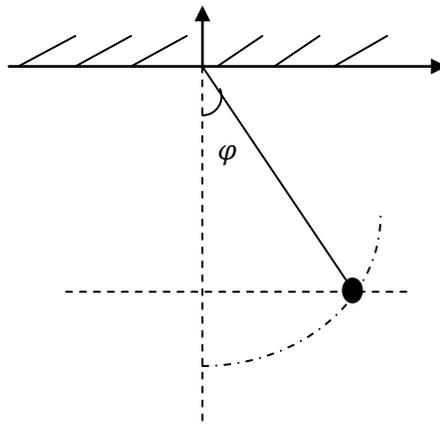


Figura 6.4 Representación del péndulo simple en el plano coordenado.

Las coordenadas cartesianas son:

$$x = \ell \sin \varphi, \quad y = -\ell \cos \varphi$$

$$\dot{x} = \ell \cos \varphi \dot{\varphi}, \quad \dot{y} = \ell \sin \varphi \dot{\varphi}$$

La energía potencial y cinética son

$$U = mgy, \quad U = -mg\ell \cos \varphi$$

La energía cinética  $T = \frac{1}{2}m(\dot{x}^2 + \dot{y}^2)$ , y por tanto la energía cinética resulta:

$$T = \frac{1}{2}m\ell^2\dot{\varphi}^2 \quad (117)$$

El lagrangiano es

$$L = T - U = \frac{1}{2}m\ell^2\dot{\varphi}^2 + mg\ell \cos \varphi \quad (118)$$

La energía total se escribe como:

$$E = \frac{1}{2}m\ell^2\dot{\varphi}^2 - mg\ell \cos \varphi \quad (119)$$

A partir de esta expresión se puede obtener una ecuación para el ángulo en función del tiempo:

Multiplicando por  $\frac{2}{m\ell^2}$

$$\frac{2E}{m\ell^2} = \dot{\varphi}^2 - \frac{2}{m\ell^2}mg\ell \cos \varphi$$

$$\frac{2E}{m\ell^2} + \frac{2g}{\ell} \cos \varphi = \dot{\varphi}^2$$

$$\frac{2E}{m\ell^2} \left( 1 + \frac{m\ell^2}{2E} \frac{2g}{\ell} \cos \varphi \right) = \dot{\varphi}^2$$

$$\frac{d\varphi}{dt} = \left(\frac{2E}{m\ell^2}\right)^{1/2} \left(1 + \frac{mg\ell}{E} \cos \varphi\right)^{1/2}$$

Es de utilidad cambiar la escala del tiempo:

$$\text{sea } s = \left(\frac{2E}{m\ell^2}\right)^{1/2} t, \quad a = \frac{mg\ell}{E},$$

y ahora la ecuación resulta ser

$$\frac{d\varphi}{ds} = (1 + a \cos \varphi)^{1/2} \quad (120)$$

Los parámetros que caracterizan al péndulo (masa, longitud de la cuerda y energía) quedan contenidos en el parámetro  $a$ .

Otra forma de escribir esta ecuación, que es de utilidad para resolverla por medio de las funciones de Jacobi, se obtiene como sigue:

$$\cos \varphi = \cos 2\frac{\varphi}{2} = \cos^2 \frac{\varphi}{2} - \sin^2 \frac{\varphi}{2} = 1 - 2\sin^2 \frac{\varphi}{2}$$

entonces tenemos:

$$\frac{d\varphi}{ds} = \left[1 + a \left(1 - 2\sin^2 \frac{\varphi}{2}\right)\right]^{1/2}$$

$$\frac{d\varphi}{ds} = \left[1 + a - 2a \sin^2 \frac{\varphi}{2}\right]^{1/2}$$

$$\text{sea } \theta = \frac{\varphi}{2}, \quad 2 \frac{d\theta}{ds} = \frac{d\varphi}{ds}$$

$$2 \frac{d\theta}{ds} = [1 + a - 2a \sin^2 \theta]^{1/2}$$

$$2 \frac{d\theta}{ds} = (1 + a)^{1/2} \left(1 - \frac{2a}{1 + a} \sin^2 \theta\right)^{1/2}$$

$$\text{sea } \tau = \frac{\sqrt{1+a}}{2} s \quad \text{y} \quad \mu = \frac{2a}{1+a}$$

Con lo cual se obtiene:

$$\frac{d\theta}{d\tau} = (1 - \mu \sin^2 \theta)^{1/2}$$

$$\frac{d\theta}{d\tau} = \sqrt{1 - \mu \sin^2 \theta} \quad (121)$$

Recordando la ecuación del colestérico que obtuvimos anteriormente ecuación (114) la cual tiene la forma

$$\frac{d^2\varphi}{dx^2} + \frac{\varepsilon_a E^2}{k_2} \sin \varphi = 0$$

su integral primera ecuación (116) es

$$\frac{d\vartheta}{d\xi} = [1 - \lambda \sin^2 \vartheta]^{1/2}$$

Donde esta ecuación tiene la misma estructura que la ecuación (121), que describe el movimiento del péndulo simple en el plano.

En esta notación, los parámetros que caracterizan al péndulo están contenidos en el coeficiente del seno cuadrado  $\mu$ . Y los que caracterizan al CL colestérico se encuentran en el parámetro  $\lambda$ ,  $\lambda = \frac{2b}{1+b}$  y  $b = \frac{2\varepsilon_a E^2}{k_2}$ .

A partir de aquí se puede calcular el tiempo que tarda el péndulo en moverse entre dos ángulos dados. Separando variables resulta:

$$d\tau = \frac{d\theta}{\sqrt{1 - \mu \sin^2 \theta}} \quad (122)$$

Integrando encontramos el tiempo transcurrido entre dos ángulos dados:

$$\begin{aligned} \tau - \tau_0 &= \int_{\theta_0}^{\theta} \frac{d\theta'}{\sqrt{1 - \mu \sin^2 \theta'}} \\ \tau &= \int_{\theta_0}^{\theta} \frac{d\theta'}{\sqrt{1 - \mu \sin^2 \theta'}} = \text{sn}^{-1}(\sin \theta | \mu) \end{aligned} \quad (123)$$

Otra forma útil de la ecuación de movimiento del péndulo se obtiene como sigue:

Tomamos la ecuación (121) y realizamos los siguientes cambios

$$y = \sin \theta, \quad y^2 = \sin^2 \theta, \quad 1 - y^2 = \cos^2 \theta$$

$$\theta = \arcsin y, \quad \frac{d\theta}{dy} = \frac{d \arcsin y}{dy} = \frac{1}{\sqrt{1 - y^2}}$$

De esta forma podemos expresar la ecuación (121) como

$$\frac{d\theta}{d\tau} = \frac{d\theta}{dy} \frac{dy}{d\tau} = \frac{1}{\sqrt{1 - y^2}} \frac{dy}{d\tau} \quad (124)$$

y elevando al cuadrado la ecuación, (124) resulta ser

$$\frac{1}{1 - y^2} \left( \frac{dy}{d\tau} \right)^2 = 1 - \mu y^2$$

$$\left( \frac{dy}{d\tau} \right)^2 = (1 - y^2)(1 - \mu y^2) \quad (125)$$

Que es la ecuación equivalente para el péndulo que estamos buscando. Su solución es:

$$\tau = \int_0^y \frac{dy'}{\sqrt{(1 - y'^2)(1 - \mu y'^2)}} = \text{sn}^{-1}(y|\mu) \quad (126)$$

## 6.2 Péndulo simple (Hamilton)

En esta sección vamos a deducir las ecuaciones diferenciales ordinarias de primer orden, para el péndulo, que se escriben en función de una función  $H$  llamada **hamiltoniano** (que en este caso puede interpretarse como la energía total del sistema, es decir, la suma de energía cinética y energía potencial). Esta reducción del orden del sistema se logra substituyendo variables de las velocidades generalizadas por unas variables abstractas de momento (también conocidas como **momentos conjugados**). Así por cada velocidad generalizada, hay un momento conjugado correspondiente.

La reducción del orden que proporcionan las ecuaciones canónicas ofrece una ventaja numérica: se pueden codificar directamente al usar un método como el Runge-Kutta cuatro.

Para el péndulo la energía cinética y potencial en coordenadas cartesianas son:

$$U = mgy, \quad T = \frac{1}{2} m(\dot{x}^2 + \dot{y}^2)$$

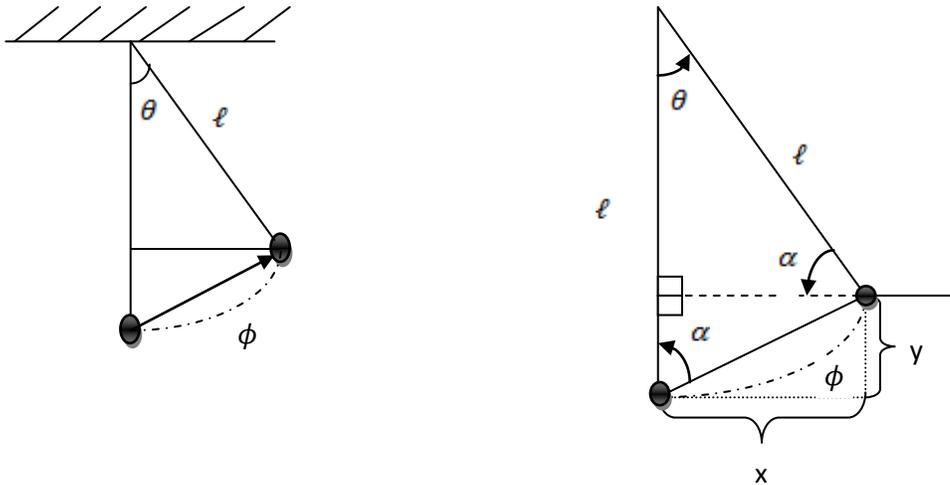


Figura 6.5 Esquema del péndulo en el plano y las coordenadas generalizadas elegidas para describir su movimiento.

El Hamiltoniano

$$H = T + U \tag{127}$$

Elegimos como coordenada generalizada el ángulo  $\varphi$ , procedemos a encontrar las ecuaciones de movimiento

$$x = \ell \cos \theta, \quad y = \ell \sin \theta$$
$$\dot{x} = -\ell \dot{\theta} \sin \theta, \quad \dot{y} = \ell \dot{\theta} \cos \theta$$

De la figura tenemos que se cumple la siguiente relación para los ángulos

$$2\alpha + \phi = \pi$$
$$\alpha = \frac{1}{2}(\pi - \theta) = \frac{\pi}{2} - \frac{\phi}{2}$$

y la relación

$$\alpha + \theta = \frac{\pi}{2}$$

entonces

$$2\alpha + \theta = 2(\alpha + \phi)$$
$$\theta = 2\phi \tag{128}$$

Sustituyendo en las relaciones de las coordenadas tenemos

$$x = \ell \cos 2\phi, \quad y = \ell \sin 2\phi$$
$$\dot{x} = -2\ell \dot{\phi} \sin 2\phi, \quad \dot{y} = 2\ell \dot{\phi} \cos 2\phi$$

por tanto

$$\dot{x}^2 + \dot{y}^2 = 2\dot{\theta}^2 \ell^2$$

entonces la energía cinética

$$T = m\dot{\theta}^2 \ell^2$$

Otra operación

$$\sin \theta = \sin(2\phi) = 2 \sin \phi \cos \phi$$

La energía potencial  $U$  en términos de  $\phi$

$$U = mg \ell \sin \theta = 2mg \ell \sin \phi \cos \phi \quad (129)$$

Expresando T en términos de  $\phi$

$$T = \frac{m}{2} [\ell^2 \dot{\phi}^2 \sin^2 \phi + \ell^2 \dot{\phi}^2 \cos^2 \phi] = \frac{m}{2} \ell^2 \dot{\phi}^2 \quad (130)$$

La hamiltoniana y la lagrangiana en la coordenada  $\phi$  tienen la forma

$$H = T + U = \frac{1}{2} m \ell^2 \dot{\phi}^2 + 2mg \ell \sin \phi \cos \phi \quad (131)$$

$$L = \frac{1}{2} m \ell^2 \dot{\phi}^2 - 2mg \ell \sin \phi \cos \phi \quad (132)$$

por tanto

$$\dot{\phi} = \frac{\partial H}{\partial P_{\phi}}, \quad \dot{P}_{\phi} = -\frac{\partial H}{\partial \phi}$$

$$P_{\phi} = \frac{\partial L}{\partial \dot{\phi}} = m \ell^2 \dot{\phi}$$

$$\dot{\phi} = \frac{P_{\phi}}{m \ell^2}$$

por tanto la hamiltoniana nos queda

$$H = \frac{1}{2} m \ell^2 \frac{P_{\phi}^2}{m^2 \ell^4} + 2mg \ell \sin \phi \cos \phi = \frac{P_{\phi}^2}{m \ell^2} + 2mg \ell \sin \phi \cos \phi \quad (133)$$

ahora

$$\dot{\phi} = \frac{\partial H}{\partial P_{\phi}} = \frac{1}{m \ell^2} P_{\phi}$$

$$\dot{P}_{\phi} = -\frac{\partial H}{\partial \phi} = -\frac{\partial}{\partial \phi} (mg \ell \sin 2\phi) = -2mg \ell \cos 2\phi$$

Las ecuaciones canónicas

$$\dot{\phi} = \frac{1}{m \ell^2} P_{\phi} \quad (134)$$

$$\dot{P}_{\phi} = -2mg \ell \cos 2\phi \quad (135)$$

Con el propósito de codificar el programa en el Mathematica, hacemos el cambio de variable que nos va a permitir simplificar las constantes que se manejan en el problema y las condiciones iniciales, entonces:

$$\phi = x, \quad P_\phi = y$$

$$\dot{x} = ay$$

$$\dot{y} = -b \cos 2x$$

$$\text{con } a = \frac{1}{m\ell^2} \text{ y } b = -2m\ell g$$

Las ecuaciones toman la forma

$$\dot{x} = f(x, y)$$

$$\dot{y} = g(x, y)$$

con

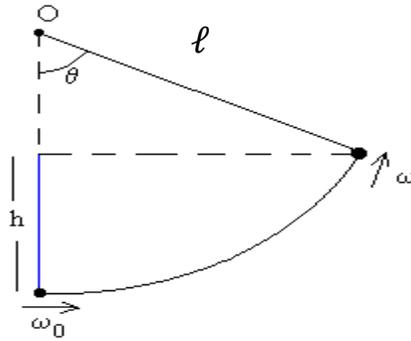
$$f(x, y) = ay$$

$$g(x, y) = -b \cos 2x$$

De la ecuación para el tiempo transcurrido ecuación (123), mientras el péndulo se mueve entre dos ángulos dados:

$$\tau - \tau_0 = \int_{\theta_0}^{\theta} \frac{d\theta'}{\sqrt{1 - \mu \sin^2 \theta'}}$$

se ve que cuando  $\mu$  tiende a la unidad y el ángulo  $\theta$  tiende a  $\pi$ , la diferencia de tiempos  $\tau - \tau_0$  tiende a infinito. Esto significa que existe un caso en el que la lenteja del péndulo nunca llega hasta la parte más alta, de modo que nunca podrá completar su vuelta. Esto nos permite trabajar con una gráfica de  $\dot{\theta}$  contra  $\theta$  en la que se pueden identificar dos regiones separadas por una línea que se llama precisamente separatriz. Una de las regiones corresponde al caso en que el péndulo puede dar la vuelta completa mientras que la otra muestra el caso en que el péndulo ejecuta oscilaciones.



El razonamiento es como sigue: la energía total del péndulo está determinada por las condiciones iniciales  $(\theta, \dot{\theta})$  como se ve de la siguiente ecuación, donde  $\theta_0$  es la desviación máxima

$$E = \frac{1}{2} m \ell^2 \frac{\dot{\theta}^2}{m^2 \ell^4} + mg\ell(1 - \cos \theta) \quad (136)$$

Entonces para el máximo de la energía potencial esto es cuando  $\theta = \pi$ , podemos clasificar las soluciones del problema del péndulo en tres clases:

Primera clase: las soluciones que corresponden a rotaciones, cuando se cumple que

$$E > 2mg\ell \quad (137)$$

Segunda clase: la que corresponde a la separatriz, cuando se cumple que

$$E = 2mg\ell \quad (138)$$

Tercera clase: la que corresponde a las libraciones, u oscilaciones, cuando se cumple que

$$E < 2mg\ell \quad (139)$$

En las soluciones de primera clase la energía cinética nunca se anula, de modo que el péndulo se mantiene rotando. Este caso particular del péndulo mecánico es el que corresponde a la ecuación análoga de la configuración del cristal líquido colestérico.

Las soluciones de tercera clase del péndulo son análogas al caso en que el campo electrostático destroza la configuración del colestérico, por lo que el sistema deja de existir.

En una gráfica de  $\dot{\theta}$  versus  $\theta$  se ve que:

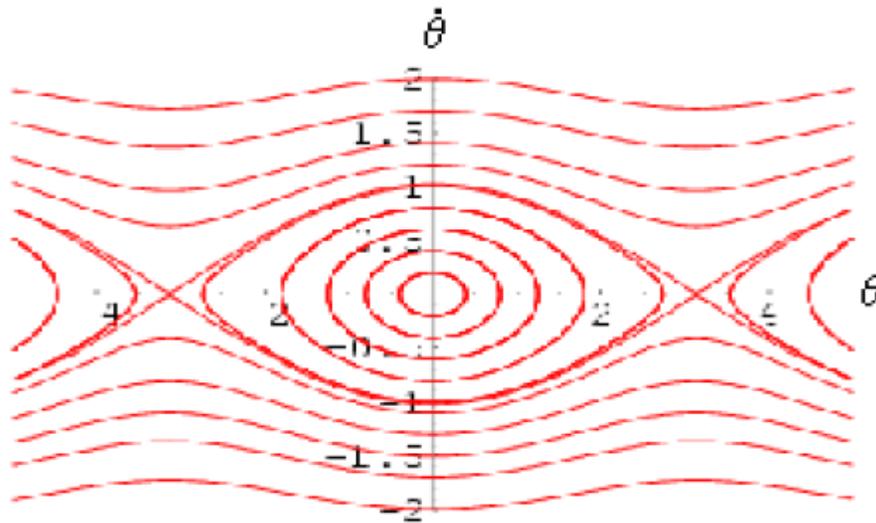


Figura 6.6 La configuración de un CL colestérico bajo la acción de un campo eléctrico perpendicular a su eje, y también el péndulo dando vueltas, se representa en la parte superior de la gráfica.

# Capítulo 7

## Resultados y Discusiones

En este capítulo vamos a presentar las gráficas que se obtuvieron al resolver numéricamente las ecuaciones canónicas del péndulo para diferentes velocidades iniciales. El método de solución fue el de Runge- Kutta de cuarto orden. Analizaremos los resultados obtenidos en la representación gráfica y discutiremos la analogía que existe, en cada caso, con el movimiento del cristal líquido colestérico en la presencia de un campo eléctrico uniforme.

### 7.1 Gráficas de la trayectoria del péndulo en el plano y algunas analogías con el CL colestérico

Introduciendo condiciones iniciales en las que la energía cinética nunca se anula tenemos soluciones de la primera clase, cuyas gráficas, en el plano de oscilación del péndulo, son de la forma que sigue:

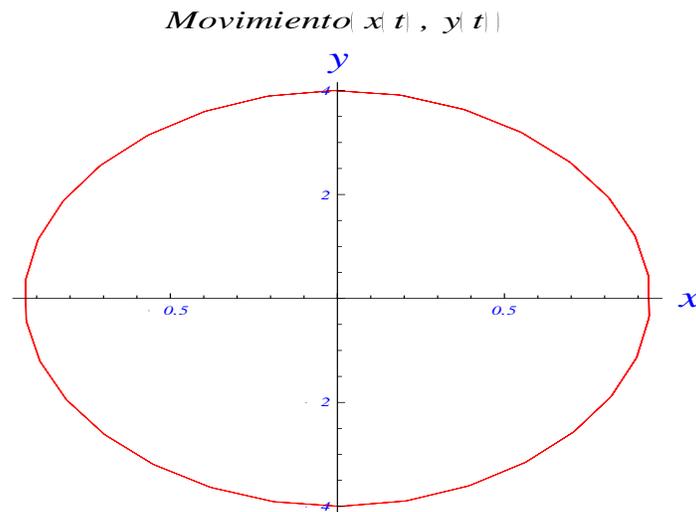


Figura 7.1 Trayectoria cuando la energía inicial del péndulo es suficiente para que la lenteja de una vuelta completa.

Si cambiamos la velocidad inicial para tener distintas energías tenemos:

*Movimiento  $x(t), y(t)$*

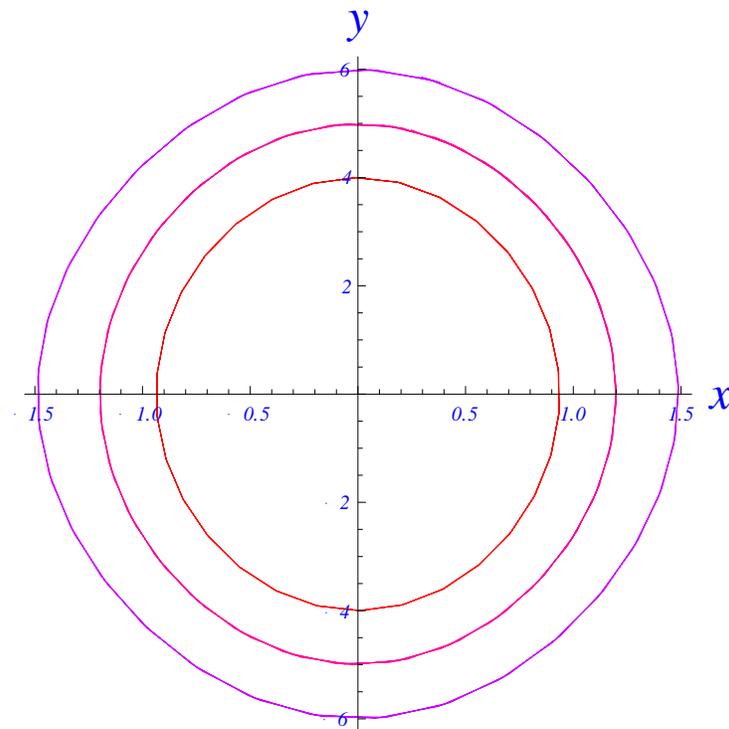


Figura 7.2 Trayectorias del péndulo con tres energías diferentes para el caso en que la lenteja da una vuelta completa.

Si se modifican las condiciones iniciales paulatinamente encontramos que existe un caso en el que el péndulo nunca completa su vuelta, es cuando encuentra la separatriz, que corresponde a las soluciones de segunda clase:

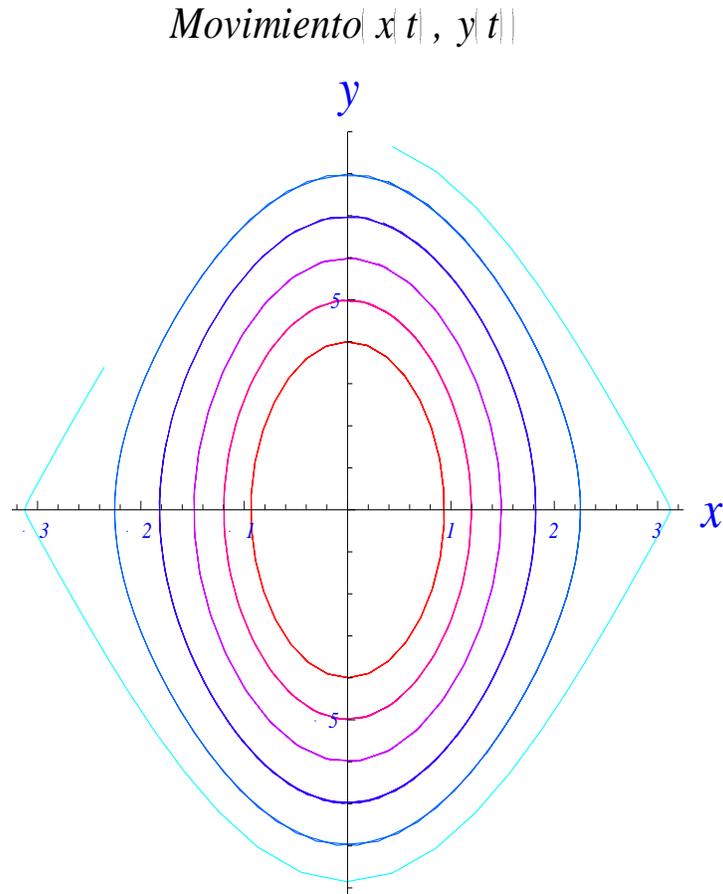


Figura 7.3 Trayectorias del péndulo con energías diferentes. En la última de ellas la energía es insuficiente para que la lenteja de una vuelta completa. Corresponde al caso en que el periodo tiende a infinito.

## 7.2 Gráficas del ángulo del péndulo con la vertical y algunas analogías con el CL colestérico

Los resultados que se obtienen para el péndulo corresponden a los de la configuración del cristal líquido colestérico si en lugar del tiempo consideramos la coordenada  $x$ , que en ese sistema significa trasladarse a lo largo del eje del colestérico.

La ecuación diferencial de segundo orden para la configuración en el ordenamiento del CL colestérica es

$$\frac{d^2\varphi}{dx^2} + \frac{\varepsilon_a E^2}{k_2} \sin \varphi = 0$$

la forma de la primera integral tiene la forma

$$\frac{d\vartheta}{d\xi} = [1 - \lambda \sin^2 \vartheta]^{1/2}$$

$$\text{con } \lambda = \frac{2b}{1+b} \text{ y } b = \frac{2\varepsilon_a E^2}{k_2}.$$

La ecuación diferencial que describe el movimiento en el plano del péndulo simple en coordenadas polares es la siguiente

$$\frac{d^2\varphi}{dx^2} + \omega_0^2 \sin \varphi = 0$$

con  $\omega_0^2 = g/\ell$ , donde  $g$  es el modulo de la aceleración de la gravedad y  $\ell$  la longitud de la barra del péndulo.

En la sección anterior obtuvimos la ecuación que describe el movimiento de la lenteja en el plano que la podemos escribir como

$$\frac{d\theta}{d\tau} = (1 - \mu \sin^2 \theta)^{1/2}$$

$$\text{con } \mu = \frac{2a}{1+a} \text{ y } a = \frac{mg\ell}{E}.$$

Existe gran similitud entre la ecuación diferencial que describe la configuración del CL colestérico y la ecuación que describe el movimiento del péndulo simple en el plano.

Los parámetros que caracterizan al sistema formado por el colestérico encerrado dentro de una caja con forma de prisma cuadrangular y un campo electrostático aplicado están en el coeficiente del seno del ángulo. Cuando el campo electrostático es cero, queda solamente el primer término, de donde resulta que el ángulo variará linealmente con  $x$ , de tal modo que en una gráfica del ángulo respecto a  $x$  resulta una recta.

Al igual que para el péndulo simple los parámetros que caracterizan al péndulo están contenidos en el coeficiente del seno cuadrado  $\mu$ .

Si graficamos las soluciones numéricas considerando en la vertical el ángulo descrito por el péndulo y el tiempo en la horizontal, se obtienen los siguientes resultados que corresponden al caso de las libraciones (u oscilaciones) del péndulo. Ninguna de ellas corresponde al caso de un cristal líquido colestérico:

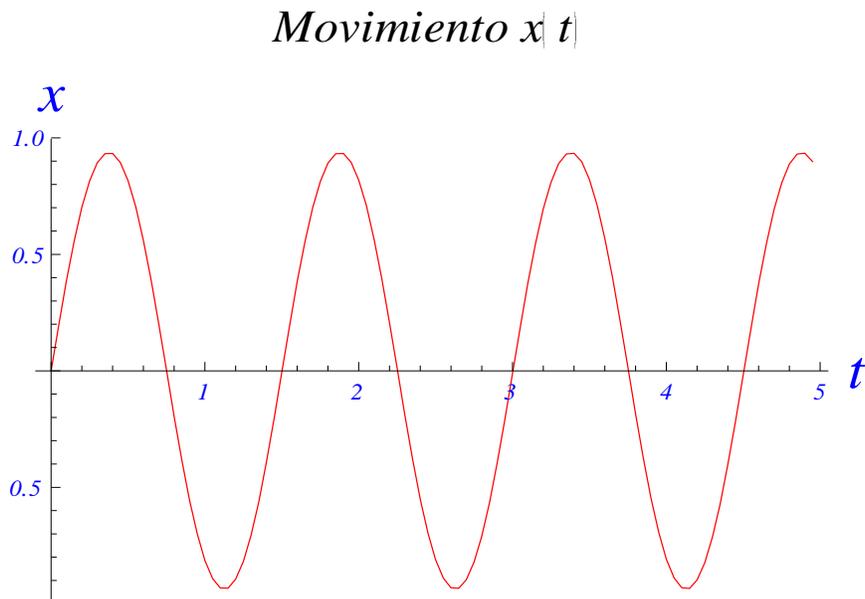


Figura 7.4  $x(t)$  es el ángulo con respecto a la vertical. Oscila con el tiempo de acuerdo a la descripción de una de las funciones elípticas de Jacobi. No corresponde a la configuración de un cristal líquido colestérico.

## Movimiento $x|t$

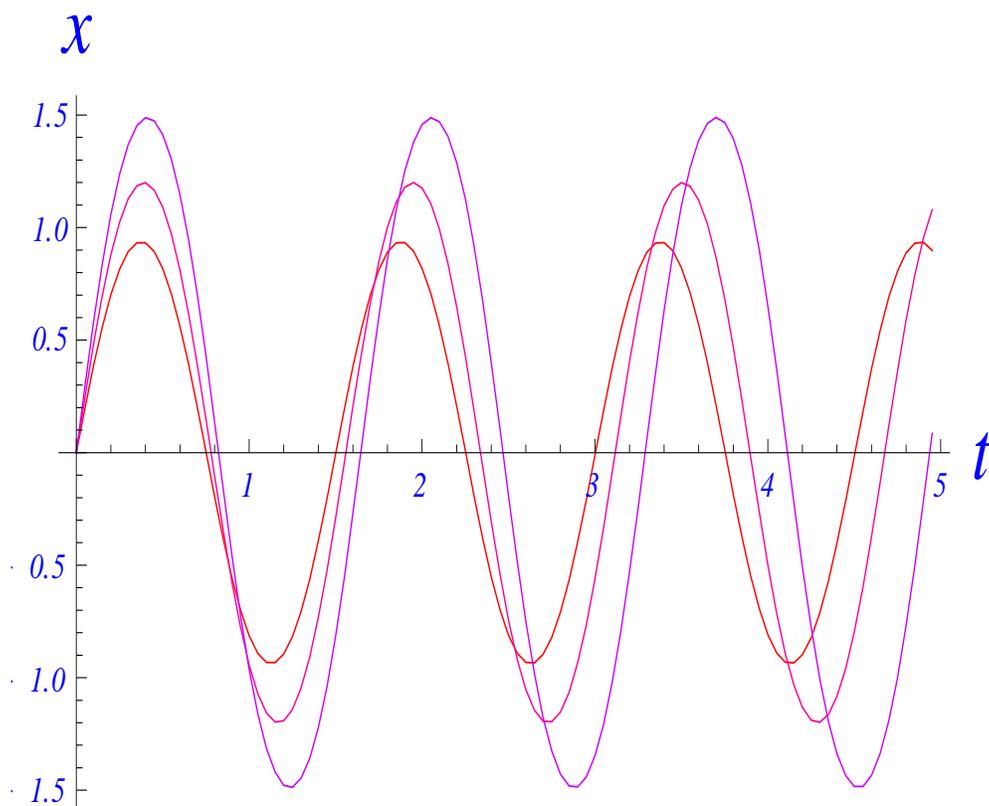


Figura 7.5 Varias energías de la lenteja del péndulo. El ángulo con respecto a la vertical oscila en el tiempo de acuerdo a la descripción de una de las funciones elípticas de Jacobi. No corresponde a la configuración de un cristal líquido colestérico.

# Movimiento $x(t)$

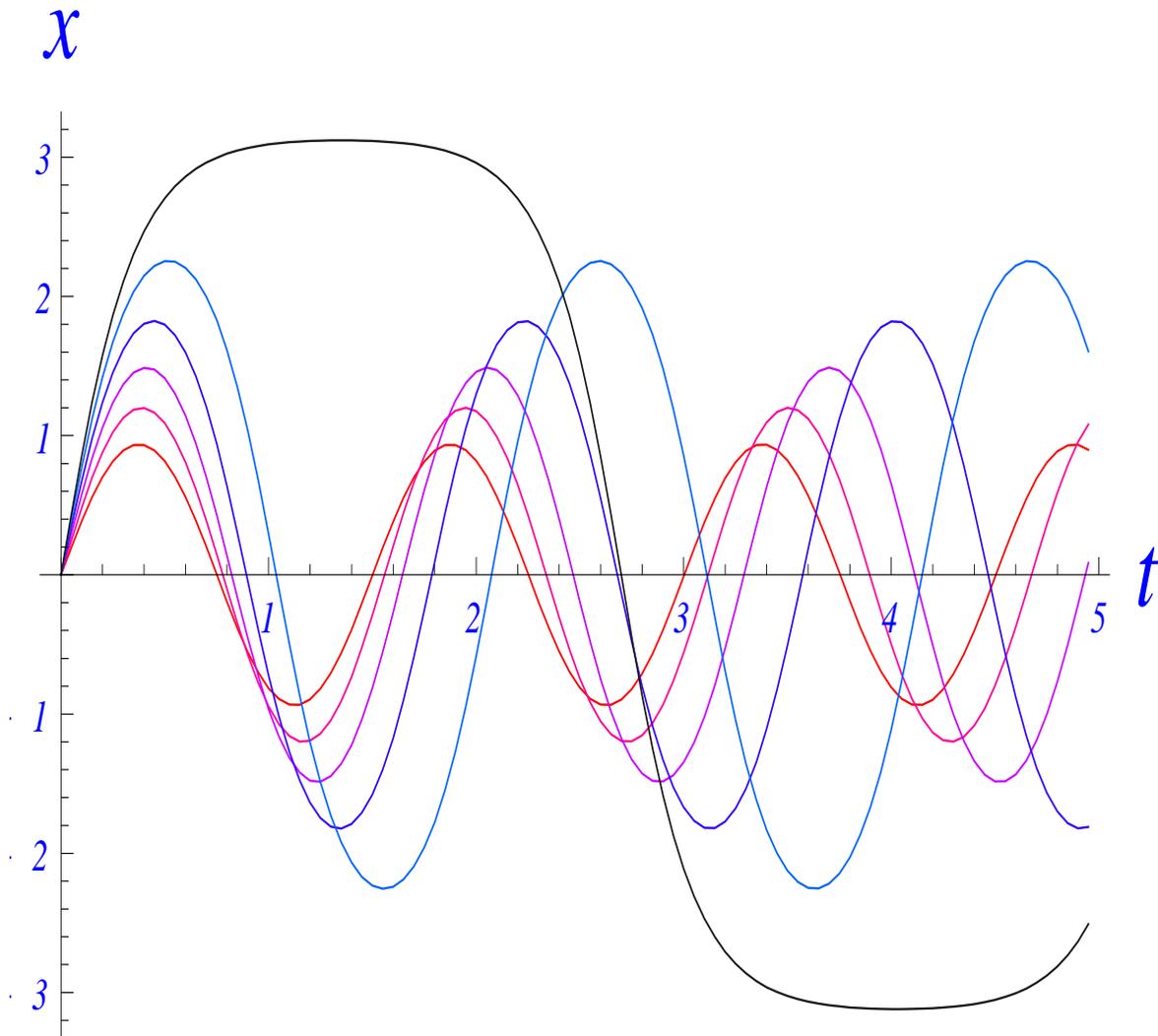


Figura 7.6 La lenteja del péndulo alcanza energías más altas. La conducta del ángulo en el tiempo se aleja mucho de la conducta senoidal típica de las oscilaciones pequeñas. Nótese en especial la curva negra que no alcanza a completar un periodo. Su forma redondeada se aparta totalmente de las senoidales.

Para el caso de péndulos con energías cinéticas suficientemente altas, tal que las soluciones son las de primera clase, corresponden en el caso del colestérico a campos electrostáticos lo suficientemente pequeños como para no desbaratar la configuración helicoidal. Entonces tenemos soluciones que se levantan de manera similar a la recta pero con ondulaciones como se ve en la gráfica de enseguida:

## Movimiento $x(t)$

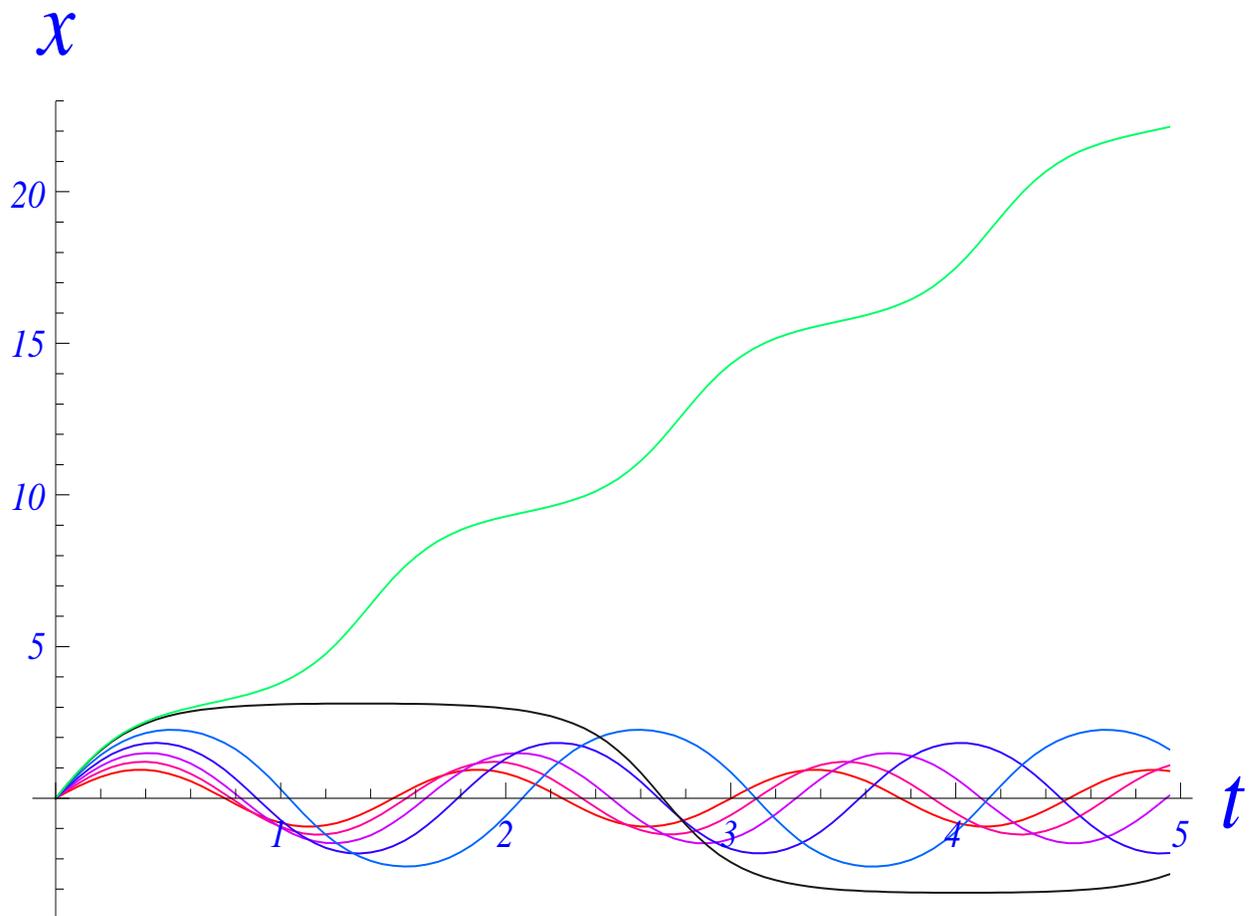


Figura 7.7 Todas las curvas corresponden a la conducta de un ángulo de un péndulo evolucionando en el tiempo, pero no todos pueden corresponder a un colestérico. Solamente la gráfica verde puede describir una configuración de un CL colestérico bajo la acción de un campo eléctrico en el sentido explicado en el texto.

La función  $x(t)$  describe el ángulo de orientación del director  $\hat{n}$  de un cristal líquido colestérico que gira conforme avanzamos en dirección paralela al eje de orientación del CL. En este caso el parámetro  $t$  se refiere a la distancia recorrida a lo largo de dicho eje. Si no hay campo eléctrico aplicado sobre el colestérico la curva verde debería ser una recta, lo cual indica que al avanzar desde 0 hacia 5 en el eje horizontal, el ángulo de giro cambia de manera uniforme (pendiente de la curva).

En su lugar, la curva verde indica que la presencia de un campo eléctrico da lugar a oscilaciones en ese cambio de la orientación del ángulo, haciendo que al principio sea más rápido, luego más lento, después más rápido de nuevo, etcétera.

Esos cambios en la rapidez con que gira el vector director  $\hat{n}$  puede ser detectado mediante el envío de ondas electromagnéticas que viajen a lo largo del eje de giro, pero es un tema que se encuentra al margen del propósito de este trabajo.

En cambio, las gráficas que tienden a oscilar a lo largo del eje horizontal corresponden a un antiguo cristal líquido que ha perdido la configuración de un colestérico debido a la presencia del campo eléctrico.

Las soluciones de primera clase del péndulo tienen su análogo en la configuración del colestérico, como se observa en las siguientes curvas. Cuando el campo es cero tenemos una recta, pero cuando va creciendo la curva empieza a ondularse a la vez que disminuye su inclinación. Esto significa que el paso del colestérico (periodo en el caso del péndulo) se alarga. Eso indica que el campo electrostático está estirando al colestérico. La cuarta curva indica que cuando el campo crece demasiado, terminar por destruir la configuración de colestérico.

# Movimiento $x(t)$

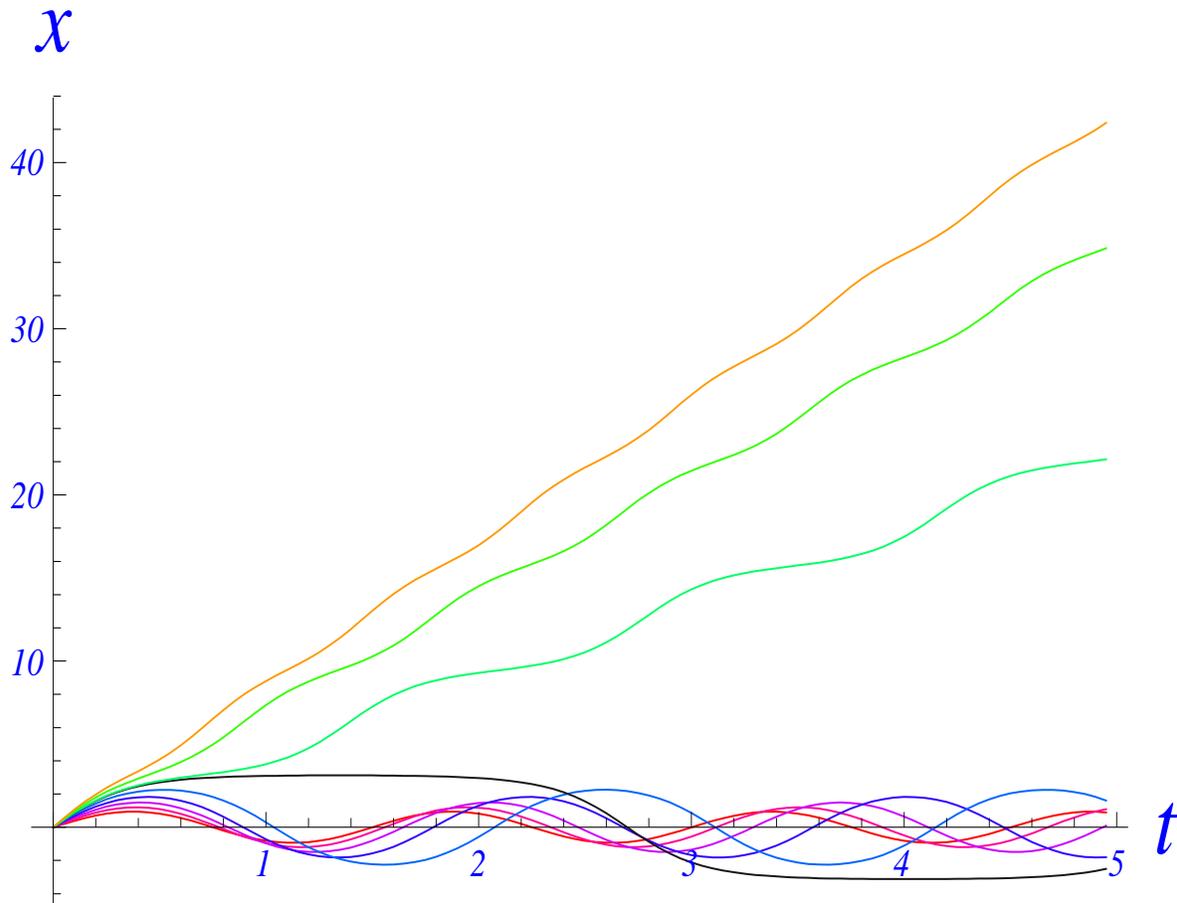


Figura 7.8 Se representa el incremento en la magnitud del campo eléctrico que aplaza el periodo de oscilación que describe el colestérico. La gráfica naranja corresponde al menor valor para la magnitud del campo eléctrico mientras que las gráficas verdes corresponden a valores mayores de la magnitud del campo eléctrico.

# Movimiento $x|t$

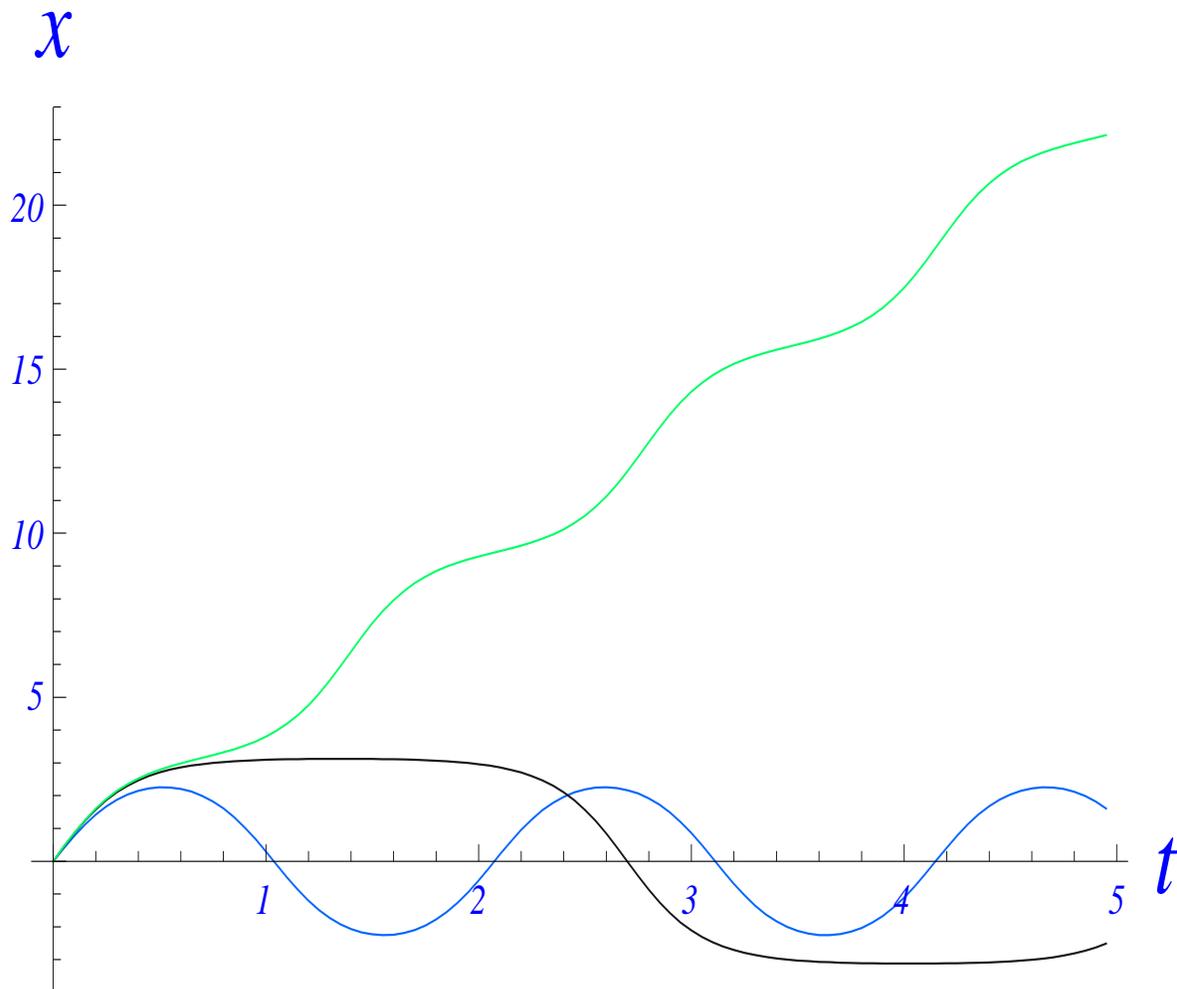


Figura 7.9 Representación de los tres casos de oscilación para el péndulo plano, la gráfica negra corresponde al caso en que la oscilación no completa el periodo pero se aleja de las pequeñas oscilaciones del péndulo simple. La gráfica azul pertenece al proceso donde el péndulo tiene la energía suficiente para oscilar en forma senoidal. La grafica verde corresponde al modo en que un colestérico oscila bajo la presencia de un campo eléctrico uniforme aplicado perpendicular a su eje de orientación. Cuando no existe presencia de campo eléctrico la gráfica verde se reduce a una línea recta describiendo el movimiento de un péndulo plano que presenta un desplazamiento angular uniforme.

## Conclusiones

El tratamiento de la configuración de un cristal líquido colestérico contenido en una caja de paredes planas y bajo la acción de un campo eléctrico uniforme es matemáticamente análogo al de un péndulo plano.

El conjunto de las soluciones físicamente aceptables es más amplio en el sistema de péndulo plano, ya que la configuración de un colestérico es análogo únicamente al caso en el que el péndulo ejecuta vueltas completas alrededor del punto que lo mantiene fijo.

En el péndulo la variable independiente es el tiempo y en la configuración del CLC es la distancia recorrida en la dirección del eje del CLC.

En ambos casos la variable dependiente es un ángulo. Para el péndulo plano se trata del ángulo que forma la cuerda con la dirección del campo uniforme.

La constante elástica de torsión del CLC,  $k_2$ , es análoga a la longitud de la cuerda del péndulo.

El cuadrado del campo eléctrico aplicado al CLC es análogo a la magnitud de la energía mecánica total del péndulo.

La formulación de la teoría que permite obtener analíticamente las configuraciones de cristales líquidos es una teoría clásica de campo que se formula a partir de un principio de mínima acción en la que se usa la energía libre de Helmholtz en lugar de la función lagrangiana. Las ecuaciones que describen la configuración del cristal líquido son ecuaciones de Lagrange.

Debido a lo anterior, se trata de una teoría de campo que descansa directamente sobre la termodinámica de los medios continuos y la teoría de la elasticidad de los materiales.

Esta tesis es una muestra de que es recomendable obtener una formación teórica tan amplia como sea posible, pues hemos encontrado que para la formulación del problema concreto que hemos discutido, convergen: la termodinámica, la teoría de la elasticidad y una teoría clásica de campos ligeramente modificada. A su vez, para la solución del problema se requiere la mecánica clásica.

# Apéndice A

## Funciones elípticas

Damos una breve introducción a la teoría de las funciones elípticas, empezamos el apéndice definiendo a las funciones doblemente periódicas a continuación.

Una función  $F(z)$  es doblemente periódica, con periodo  $\eta$  y  $\eta'$  (con  $\eta/\eta'$  evaluado en los complejos y parte imaginaria definida positiva), si

$$F(z + m\eta + n\eta') = F(z) \quad (A1)$$

con  $n, m \in \mathbb{Z}$  pero tal que  $n = m = 0$  no puede ocurrir.

Las funciones elípticas son funciones doblemente periódicas y se definen como soluciones,  $y(x, \bar{a})$ , de las ecuaciones diferenciales no lineales ordinarias

$$\left(\frac{dy}{dx}\right)^2 = a_4y^4 + a_3y^3 + a_2y^2 + a_1y + a_0 \quad (A2)$$

donde

$$\bar{a} = (a_0, a_1, \dots, a_4)$$

Su solución formal es

$$\frac{dy}{dx} = \sqrt{a_4y^4 + a_3y^3 + a_2y^2 + a_1y + a_0} \quad (A3)$$

$$\frac{dy}{\sqrt{a_4y^4 + a_3y^3 + a_2y^2 + a_1y + a_0}} = dx$$

Integrando

$$x(y, \bar{a}) = x_0 \pm \int_{y_0(\bar{a})}^y \frac{ds}{\sqrt{a_4s^4 + a_3s^3 + a_2s^2 + a_1s + a_0}} \quad (A4)$$

con condiciones iniciales

$$x(y_0, \bar{a}) = x_0 \quad (A5)$$

Las funciones elípticas de Jacobi son aquellas en que el polinomio de cuarto grado es de la forma

$$(1 - y^2)(1 - my^2) \quad (\text{A6})$$

con  $m$  una constante positiva.

Las funciones de Weierstrass son aquellas en que el polinomio es de tercer orden ( $a_4, a_2 = 0$ ) y de la forma

$$4y^3 - g_2y - g_3$$

con  $g_2, g_3$  constantes.

La función elíptica de Jacobi  $\text{sn}(z|m)$  esta definida en términos de la inversa de la integral

$$z = \int_0^\varphi \frac{d\theta}{\sqrt{1 - m\text{sen}^2\theta}} = \int_0^{\text{sen } \varphi} \frac{dy}{\sqrt{(1 - y^2)(1 - my^2)}} \equiv \text{sn}^{-1}(\text{sen } \varphi|m) \quad (\text{A7})$$

$$m > 0, \quad 0 \leq \varphi \leq 2\pi$$

Cuando  $m = 0$  obtenemos

$$\text{sn}^{-1}(\text{sen } \varphi|m = 0) = \int_0^\varphi \frac{d\theta}{1} = \varphi \quad (\text{A8})$$

La ecuación diferencial

$$\left(\frac{dy}{dz}\right)^2 = (1 - y^2)(1 - my^2) \quad (\text{A9})$$

cuya solución es de la forma

$$y(z) = \begin{cases} \text{sn}(z|m) & \text{para } m < 1 \\ \frac{1}{\sqrt{m}} \text{sn}\left(\sqrt{m}z \middle| \frac{1}{m}\right) & \text{para } m > 1 \end{cases} \quad (\text{A10})$$

de la ecuación (A9)

$$\left(\frac{dy}{dz}\right)^2 = (1 - y^2)(1 - my^2)$$

con el cambio

$$y = \sin \varphi \quad 1 - y^2 = 1 - \sin^2 \varphi = \cos^2 \varphi$$

$$\frac{dy}{d\varphi} = \cos \varphi, \quad \left(\frac{dy}{d\varphi}\right)^2 = \cos^2 \varphi = 1 - \sin^2 \varphi = 1 - y^2$$

$$y^2 = \sin^2 \varphi = 1 - \cos^2 \varphi$$

$$\Rightarrow (1 - y^2)[1 - my^2] = \cos^2 \varphi [1 - m(1 - \cos^2 \varphi)]$$

$$= \cos^2 \varphi [1 - m + m \cos^2 \varphi]$$

$$= (1 - m) \cos^2 \varphi + m \cos^4 \varphi$$

$$\varphi = \varphi(x)$$

$$\frac{dy}{dx} = \frac{dy}{d\varphi} \frac{d\varphi}{dx}$$

Haciendo la sustitución  $y = \sin \varphi$ , la ecuación diferencial resulta ser

$$\left(\frac{d\varphi}{dz}\right)^2 = 1 - m \sin^2 \varphi \quad (A11)$$

así que su solución es

$$\varphi(z) = \arcsin[\operatorname{sn}(z|m)] \quad (A12)$$

Las funciones elípticas proporcionan las soluciones generales de ecuaciones diferenciales de la forma

$$\left(\frac{dy}{dx}\right)^2 = f(y) \quad (A13)$$

con  $f(y)$  un polinomio de la función  $y$  que satisface la ecuación.

Muchos polinomios  $f(y)$  se pueden factorizar para tener la forma

$$f(y) = (1 - y^2)(1 - k^2 y^2) \quad (A14)$$

con  $0 \leq y \leq 1$ .

Si las condiciones iniciales son

$$y(0) = 0, \quad \frac{dy}{dx} > 0 \quad (A15)$$

la solución se denota como

$$y(x) = sn(x, k) \quad (A16)$$

se llama función sn modulo k y en el software Mathematica se dispone de un comando para dibujarlas  $Plot[JacobiSN[x, k], \{x, -10, 10\}]$ . Esta notación se usa por que  $\lim_{k \rightarrow 0} sn(x) = \sin(x)$ .

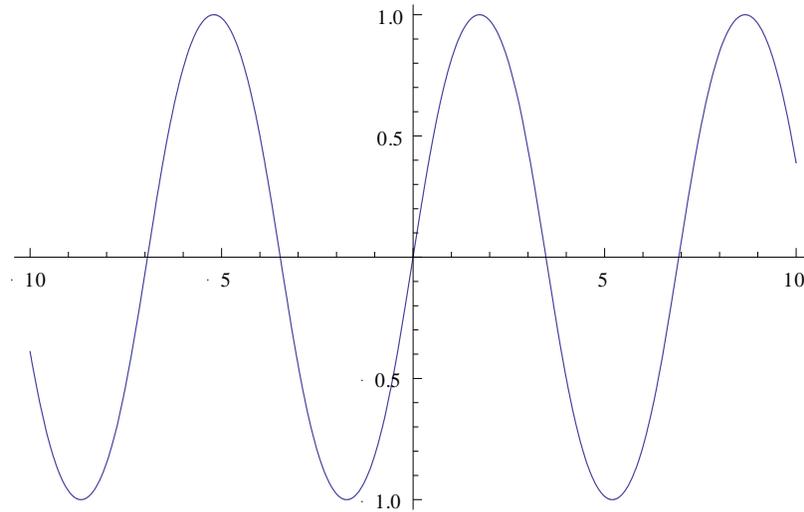


Figura A.1 Grafica de la función  $sn(x, k)$  de Jacobi.

De la ecuación se puede separar

$$\left(\frac{dy}{dx}\right)^2 = f(y) \quad (A17)$$

$$\left(\frac{dy}{dx}\right)^2 = (1 - y^2)(1 - k^2 y^2)$$

$$\frac{dy}{dx} = \sqrt{(1 - y^2)(1 - k^2 y^2)}$$

$$\frac{dy}{\sqrt{(1 - y^2)(1 - k^2 y^2)}} = dx$$

$$x = \int_0^y \frac{dy'}{\sqrt{(1 - y'^2)(1 - k^2 y'^2)}} = \operatorname{sn}^{-1}(x, k) \quad (\text{A18})$$

Esta última es la función inversa de sn módulo k y en el software Mathematica se dibuja con la orden `Plot[InverseJacobiSN[x, k], {x, -1, 1}]`.

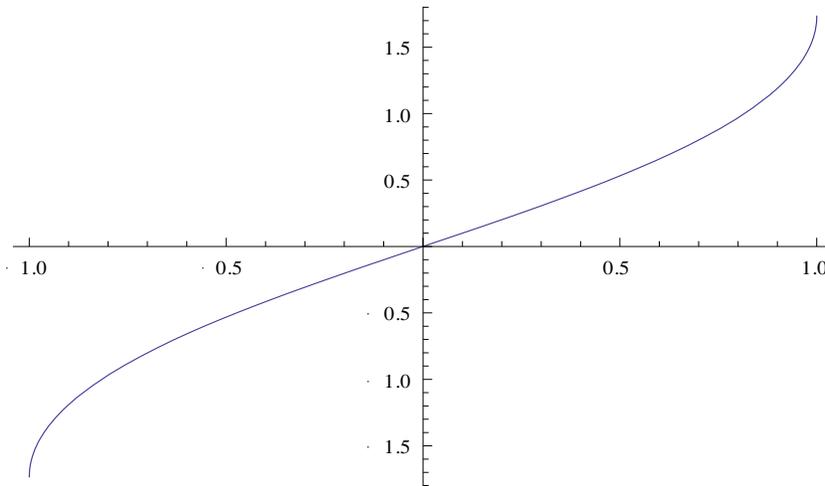


Figura A.2 Grafica de la función  $\operatorname{sn}^{-1}(x, k)$  de Jacobi.

El desarrollo en serie de Taylor sn módulo k también se puede obtener fácilmente con una orden, es: `Series[JacobiSN[z, k], {z, 0, 7}]`.

El resultado es

$$\begin{aligned} \operatorname{sn}(x, k) = & x + \left(-\frac{1}{6} - \frac{k}{6}\right)x^3 + \frac{1}{120}(1 + 14k + k^2)x^5 \\ & + \frac{(-1 - 135k - 135k^2 - k^3)}{5040}x^7 + O(x)^8 \end{aligned}$$

Así como  $\text{sn}$  es la generalización de la función seno para oscilaciones finitas, se puede definir algo que sea generalización de la función coseno

$$\text{cn}^2(x) = 1 - \text{sn}^2(x) \quad (\text{A19})$$

y para cualquier módulo

$$\text{dn}^2(x) = 1 - k^2 \text{sn}^2(x) \quad (\text{A20})$$

Estas tres son las funciones elípticas de Jacobi.

La función  $\text{sn}(z|m)$  tiene un periodo puramente real  $4K$ , donde

$$K \equiv \text{cuarto de periodo} \equiv K(m) = \int_0^{\pi/2} \frac{d\theta}{\sqrt{1 - m \sin^2 \theta}} \quad (\text{A21})$$

Además tiene un periodo puramente imaginario  $4iK'$ , donde

$$iK' \equiv iK(m) = i \int_0^{\pi/2} \frac{d\theta}{\sqrt{1 - m' \sin^2 \theta}} \quad (\text{A22})$$

con  $m' = 1 - m \equiv$  módulo complementario

Las funciones elípticas de Jacobi adicionales  $\text{cn}(z|m)$  y  $\text{dn}(z|m)$  como

$$z = \int_{\text{cn}(z|m)}^1 \frac{dy}{\sqrt{(1-y^2)(m'+my^2)}} = \int_{\text{dn}(z|m)}^1 \frac{dy}{\sqrt{(1-y^2)(y^2-m')}} \quad (\text{A23})$$

Estas tienen las propiedades siguientes

$$\text{cn}(z) \equiv \text{cn}(z|m) = \cos \varphi \quad (\text{A24})$$

$$\text{dn}(z) \equiv \text{dn}(z|m) = \sqrt{1 - m \sin^2 \varphi} \quad (\text{A25})$$

$$\text{sn}^2(z) + \text{cn}^2(z) = \text{dn}^2(z) + m \text{sn}(z) = 1 \quad (\text{A26})$$

Otras propiedades

$$\text{sn}(z|0) = \sin z \quad (\text{A27})$$

$$\operatorname{cn}(z|0) = \cos z \quad (\text{A28})$$

$$\operatorname{dn}(z|0) = 1 \quad (\text{A29})$$

$$\operatorname{sn}(z|1) = \tanh z \quad (\text{A30})$$

$$\operatorname{cn}(z|1) = \operatorname{sech} z \quad (\text{A31})$$

$$\operatorname{dn}(z|1) = \operatorname{sech} z \quad (\text{A32})$$

Sus derivadas

$$\frac{d}{dz} \operatorname{sn}(z|m) = \operatorname{cn}(z|m) \operatorname{dn}(z|m) \quad (\text{A33})$$

$$\frac{d}{dz} \operatorname{cn}(z|m) = -\operatorname{sn}(z|m) \operatorname{dn}(z|m) \quad (\text{A34})$$

$$\frac{d}{dz} \operatorname{dn}(z|m) = -\operatorname{cn}(z|m) \operatorname{sn}(z|m) \quad (\text{A35})$$

para  $m > 1$  se cumplen las siguientes identidades

$$\operatorname{sn}(z|m) = \frac{1}{\sqrt{m}} \operatorname{sn}\left(\sqrt{m}z \middle| \frac{1}{m}\right) \quad (\text{A36})$$

$$\operatorname{cn}(z|m) = \operatorname{dn}\left(\sqrt{m}z \middle| \frac{1}{m}\right) \quad (\text{A37})$$

$$\operatorname{dn}(z|m) = \operatorname{cn}\left(\sqrt{m}z \middle| \frac{1}{m}\right) \quad (\text{A38})$$

# Bibliografía

- [1] P. Palffy-Muhoray, *Orientationally Ordered Soft Matter: The Diverse World of Liquid Crystals*, Liquid Crystal Institute, Kent State University, Kent, OH 44242, USA (2007).
- [2] Denis Andrienko, *Introduction to Liquid Crystals*, IMPRS school, Bad Marienberg (2006).
- [3] José Antonio Cuesta Ruiz, *Transición Orientacional en Modelos de Cristales Líquidos*, Universidad Complutense de Madrid (1992).
- [4] Herbert B. Callen, *Thermodynamics and an Introduction to Thermostatistics*, University of Pennsylvania, John Wiley & Sons (1985)
- [5] David Chandler, *Introduction to Modern Statistical Mechanics*, University of California, Berkeley, Oxford University (1987)
- [6] Martín Rivas, *Elementos de Física de los Medios Continuos*, Universidad del País Vasco, Departamento de Física (2009)
- [7] L. D. Landau and E. M. Lifshitz, *The Classical Theory of Fields*, Pergamon, Oxford, 1971
- [8] L. D. Landau and E. M. Lifshitz, *Theory of Elasticity*, USSR Academy of Sciences, Moscow (1986)
- [9] Reisman & Paulik, *Elasticity, Theory and Applications*, J. Wiley (1983)
- [10] Herbert Goldstein, Charles Poole, John Safko, *Classical Mechanics*, Addison Wesley, Third Edition
- [11] Stephen T. Thornton, Jerry B. Marion, *Classical Dynamics of Particles and Systems*, Thomson Learning Academic Resource Center, Fifth Edition
- [12] Arnulfo Castellanos Moreno, *Energía elástica de Frank y Oseen*, Notas de curso, Departamento de Física, Universidad de Sonora, (2009)
- [13] Arnulfo Castellanos Moreno, *Ecuación de movimiento de una molécula colestérica*, Notas de curso, Departamento de Física, Universidad de Sonora, (2009)
- [14] V. I. Arnold, *Mathematical Methods of Classical Mechanics*, Springer-Verlag, Second Edition (1989)
- [15] Arnulfo Castellanos Moreno, *Péndulo Plano según Brizar*, Notas de curso Departamento de Física, Universidad de Sonora, (2009)
- [16] A.V. Bitsadze, *Equations of Mathematical Physics*, Mir Publishers Moscow (1980)
- [17] James Nearing, *Mathematical Tools for Physics*, Physics Department, University of Miami (2003)

