Problema 04_01_04

Se mide la difusividad másica de una muestra de material compuesto para su uso como material barrera para O_2. La muestra tiene forma de cubo, y se obtiene el siguiente resultado, expresado en un sistema de ejes cartesianos paralelos a los lados del cubo:

$$\underline{\underline{D}} = \begin{bmatrix} 16 & 0 & 0 \\ 0 & 10 & -6 \\ 0 & -6 & 10 \end{bmatrix} \cdot 10^{-9}\,\mathrm{m}^2/\mathrm{s}$$

Determinar cómo está cortada la muestra respecto a los ejes principales del material, expresar la difusividad en estos ejes y determinar a qué clases (cristalográficas y límites) puede pertenecer.

La difusividad, expresada en el sistema de los ejes principales, debe tener forma diagonal (éste es precisamente el criterio de definición de los ejes principales). Para determinar las direcciones principales es preciso resolver el problema de autovalores/autovectores:

$$\underline{J} = -\underline{\underline{D}} \cdot \underline{\nabla C}; \qquad \underline{\underline{D}} \cdot \underline{\nabla C} = \lambda \underline{\nabla C}; \qquad \left(\underline{\underline{D}} - \lambda \underline{\underline{\delta}}\right) \cdot \underline{\nabla C} = \underline{0}$$

es decir, buscar las direcciones en las que el gradiente y el flujo másico son colineales. Los autovalores se obtienen de la ecuación secular:

$$\begin{vmatrix} 16-\lambda & 0 & 0 \\ 0 & 10-\lambda & -6 \\ 0 & -6 & 10-\lambda \end{vmatrix} = 0 \qquad (16-\lambda)\left[(10-\lambda)^2 - 36\right] = 0$$

y son: $\lambda = 16, 16, 4 \cdot 10^{-9}$

Problema 04_01_04

Los autovectores asociados con estos autovalores se obtienen de:

$$\lambda = 16 \quad \Rightarrow \quad \left.\begin{aligned} 0x_1 &= 0 \\ -6x_2 - 6x_3 &= 0 \\ -6x_2 - 6x_3 &= 0 \end{aligned}\right\} \quad \begin{aligned} &x_1 \text{ cualquiera} \\ &x_2 + x_3 = 0 \end{aligned}$$

$$\lambda_1 = 16 \quad \Rightarrow \quad \vec{u}_1 = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}$$

$$\lambda = 4 \quad \Rightarrow \quad \left.\begin{aligned} 12x_1 &= 0 \\ 6x_2 - 6x_3 &= 0 \\ -6x_2 + 6x_3 &= 0 \end{aligned}\right\} \quad \begin{aligned} x_1 &= 0 \\ x_2 - x_3 &= 0 \end{aligned}$$

$$\lambda_2 = 4 \quad \Rightarrow \quad \vec{u}_2 = \begin{bmatrix} 0 \\ \sqrt{2}/2 \\ \sqrt{2}/2 \end{bmatrix}$$

$$\lambda_3 = 16 \quad \Rightarrow \quad \vec{u}_3 = \begin{bmatrix} 0 \\ -\sqrt{2}/2 \\ \sqrt{2}/2 \end{bmatrix}$$

Los tres autovectores los escogemos de modo que formen un triedro a derechas. La matriz de giro del sistema original ("antiguo") al nuevo, en el que la difusividad es diagonal, se construye colocando por filas los vectores de la base nueva expresados en la base antigua, es decir:

$$\underset{\sim}{L} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \sqrt{2}/2 & \sqrt{2}/2 \\ 0 & -\sqrt{2}/2 & \sqrt{2}/2 \end{bmatrix}$$

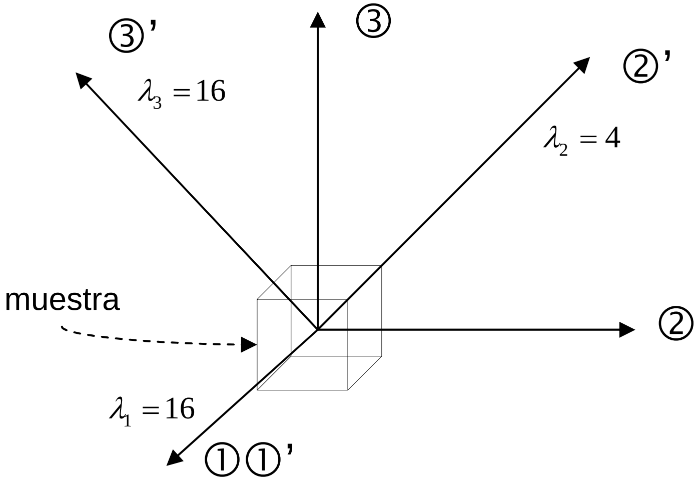
Problema 04_01_04

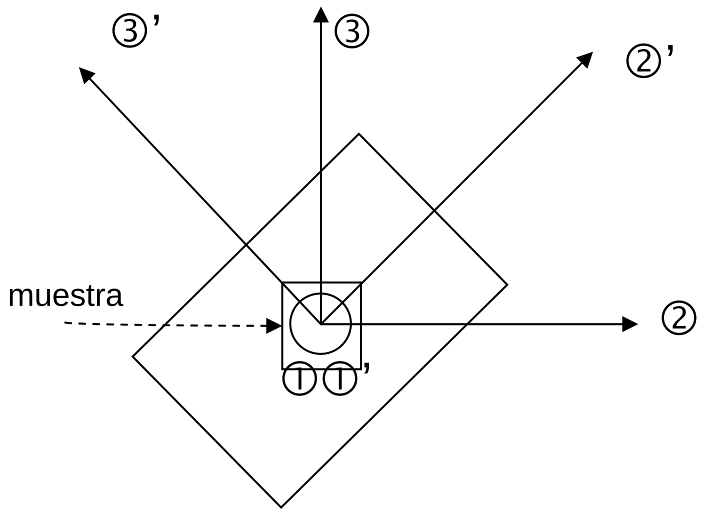
La difusividad expresada en el sistema ①'②'③' se obtiene como:

$$\underline{\underline{D}}' = \underset{\sim}{L}\,\underline{\underline{D}}\,\underset{\sim}{L}^T = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \sqrt{2}/2 & \sqrt{2}/2 \\ 0 & -\sqrt{2}/2 & \sqrt{2}/2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 16 & 0 & 0 \\ 0 & 10 & -6 \\ 0 & -6 & 10 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \sqrt{2}/2 & -\sqrt{2}/2 \\ 0 & \sqrt{2}/2 & \sqrt{2}/2 \end{bmatrix} =$$

$$\underline{\underline{D}}' = \begin{bmatrix} 16 & 0 & 0 \\ 0 & 2\sqrt{2} & 2\sqrt{2} \\ 0 & -8\sqrt{2} & 8\sqrt{2} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \sqrt{2}/2 & -\sqrt{2}/2 \\ 0 & \sqrt{2}/2 & \sqrt{2}/2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 16 & 0 & 0 \\ 0 & 4 & 0 \\ 0 & 0 & 16 \end{bmatrix}$$

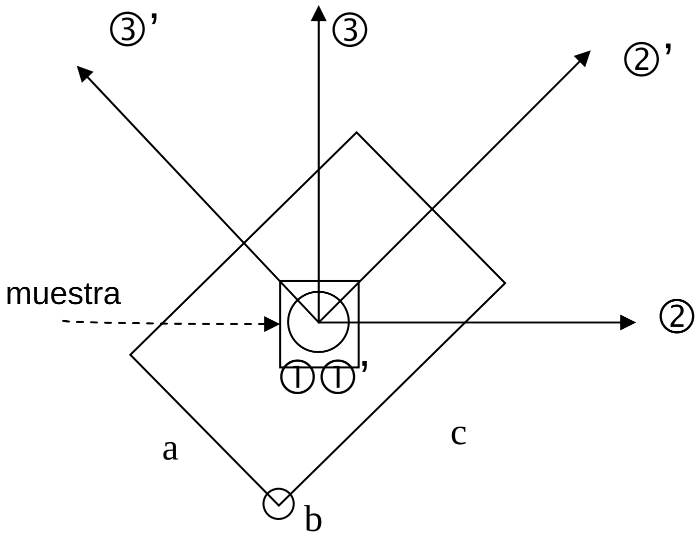
que es efectivamente diagonal. Podemos representar los ejes "antiguos" (los originales) y los "nuevos" (principales) gráficamente:





Problema 04_01_04

Por tanto, la muestra ha sido cortada del material como se ilustra en la figura de la derecha de la página anterior. También es posible identificar como direcciones cristalográficas equivalentes a y b, es decir, si el material fuera tetragonal, las que definen la base del prisma tetragonal, planos {001}, las ①' y ③'. La dirección ②' es la del eje c (lo mismo es válido para trigonal y hexagonal). Para $\infty m, \infty / mm$ el eje de simetría axial debe ser el ②' .①' y ③' pueden ser cualesquiera en el plano normal a ②' .

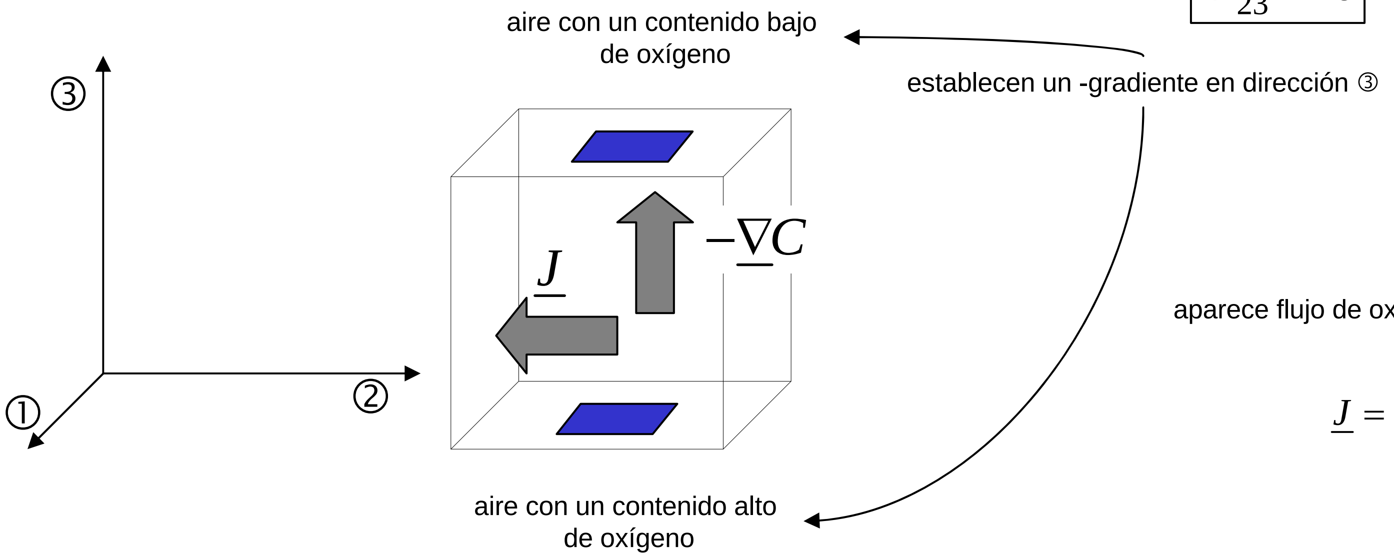


Los valores de la difusividad en los ejes principales son consistentes con un material de los sistemas cristalográficos tetragonal, hexagonal o trigonal, o de las clases límites $\infty m, \infty / mm$ (dos valores son iguales y el tercero diferente). Con las medidas disponibles no es posible diferenciar entre estas alternativas. Los valores diferentes de las difusividades en las direcciones principales indican que el flujo de oxígeno tiene lugar con mayor facilidad en una que en las otras dos. En este material el oxígeno se difunde peor en la dirección ②', como cabe esperar de un material barrera.

Problema 04_01_04

Los valores numéricos negativos para algunas componentes de la difusividad medida en el sistema ①②③ no representan ninguna contradicción física. Los experimentos en los que se mide la difusividad se realizan simplificadamente del siguiente modo:

$$\boxed{D_{23} < 0}$$



$$\underline{\nabla} C = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ \dfrac{dC(x_3)}{dx_3} < 0 \end{bmatrix}$$

aparece flujo de oxígeno en dirección -②

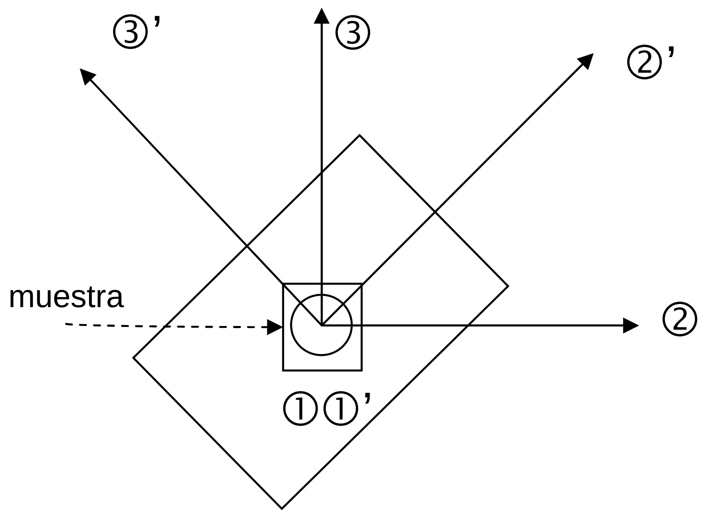
$$\underline{J} = \begin{bmatrix} 0 \\ J_2 < 0 \\ 0 \end{bmatrix}$$

Por tanto, la componente 3,2 negativa de la difusividad implica que cuando el -gradiente aplicado en la medida es positivo (hacia + ③), el flujo de oxígeno resultante es negativo (hacia -②).

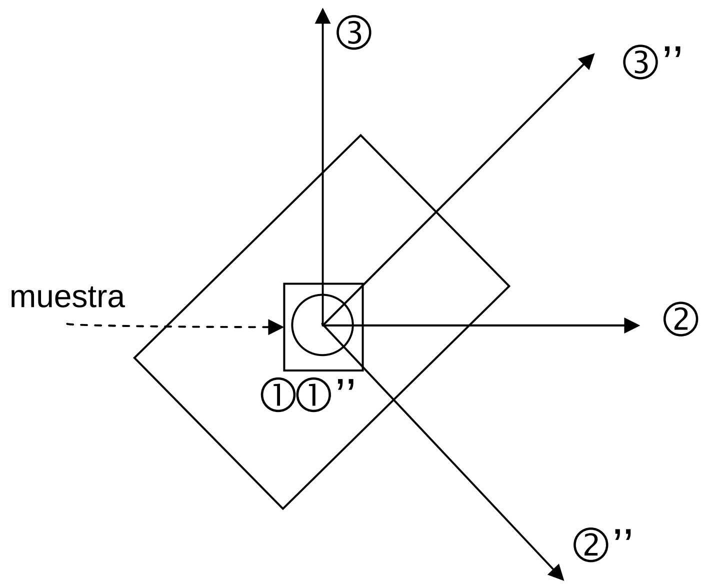
Sin embargo, una vez que la difusividad está expresada en un sistema de direcciones principales, como ①'②'③' , no puede contener elementos (diagonales) negativos que implicarían un flujo másico en contra de la fuerza impulsora debida a la diferencia de concentraciones.

Problema 04_01_04

Los ejes principales (direcciones propias) los hemos definido anteriormente sin considerar la orientación convencional, puesto que el sistema cristalográfico no es conocido. Sin embargo, para los sistemas que son consistentes con dos valores propios iguales y uno diferente (tetragonal, hexagonal o trigonal) las direcciones de los ejes cristalográficos coinciden con los ejes principales y éstos deben coincidir con los ejes cartesianos en la orientación convencional:



Ejes principales de la primera parte del problema ①'②'③'



Ejes principales de acuerdo con la orientación convencional ①''②''③''