

DIAGRAMA DE FASES DE UN MODELO DE CRISTAL LÍQUIDO ESMÉCTICO

E. Martín del Río¹, E. de Miguel²

(1) Departamento de Ingeniería Eléctrica y Térmica, Escuela Politécnica Superior de La Rábida, Universidad de Huelva, 21819 Huelva (elvira@uhu.es)

(2) Departamento de Física Aplicada, Facultad de Ciencias Experimentales, Universidad de Huelva, 21071 Huelva (demiguel@uhu.es)

Presentamos un estudio del diagrama de fases de un modelo de cristal líquido termotrópico basado en una teoría del funcional de la densidad. Las interacciones moleculares consisten en una contribución anisótropa puramente repulsiva (modelo de solapamiento gaussiano duro, HGO) a la que se añade una contribución atractiva isotrópica (modelo de pozo cuadrado, SW). Este modelo ha sido estudiado ampliamente en el caso de moléculas paralelas [1,2]. En esta contribución se amplía el anterior estudio y se considera el caso general de moléculas con grados de libertad orientacionales. El funcional de la energía libre se construye usando una aproximación no local para las contribuciones repulsivas y una aproximación de campo medio para las contribuciones atractivas.

Para una adecuada elección de los parámetros moleculares el diagrama de fases fluidas incluye: fase isotrópica, fase nemática y fase esméctica. La estabilización de esta última fase se debe a las interacciones atractivas, ya que no aparece en el caso del modelo HGO. Se observa que al aumentar el alcance de las interacciones atractivas, λ , aumenta el rango de estabilidad de la fase esméctica. Sin embargo, a partir de un cierto valor de λ esta tendencia se invierte hasta que aparece una fase nemática reentrante.

[1] E. Martín del Río y E. de Miguel, *Phy. Rev. E*, **72**, 051707 (2005)

[2] E. de Miguel y E. Martín del Río, *Phys. Rev. Lett.*, **95**, 217802 (2005)