

Diagrama de fases de un cristal líquido en una celda híbrida

D. de las Heras^{1*}, L. Mederos² y E. Velasco^{1,3}

¹ Facultad de Ciencias, C-V, Universidad Autónoma de Madrid, 28049 Madrid

² Instituto de Ciencia de Materiales, C.S.I.C., 28049 Madrid

³ Instituto Nicolás Cabrera, Universidad Autónoma de Madrid, 28049 Madrid

Estudiar la interacción entre cristales líquidos y superficies así como los efectos que sobre el diagrama de fases produce el confinamiento tiene gran interés tanto desde un punto de vista fundamental como tecnológico. Se sabe, por ejemplo, que una superficie induce por lo general orden orientacional sobre un LC, un efecto denominado anchoring. Se conoce como anchoring homogéneo cuando las partículas se orientan paralelas al plano de la superficie y anchoring homeotrópico en caso de que las moléculas se dispongan perpendiculares al sustrato. Si ahora confinamos nuestro LC entre dos de estas paredes, que seleccionan orientaciones opuestas, hemos creado lo que comúnmente se denomina celda híbrida. Una configuración de este tipo tiene un gran interés práctico, pues podría constituir la base para la fabricación de nuevos tipos de displays ópticos.

El sistema ha sido ampliamente estudiado desde un punto de vista teórico y experimental. El cristal líquido en el interior del poro se puede reorganizar de tres formas en función de la anchura de la celda y el anchoring superficial. Cuando el ancho del poro es grande, la configuración más estable consiste en una variación lineal del director (ver fase L de la figura 1), de modo que se satisfacen las condiciones de contorno y se minimiza la energía elástica. Si ahora disminuimos la anchura del poro hay dos escenarios posibles. Si el anchoring impuesto por uno de los sustratos es mucho mayor que el otro puede ser estable una fase con el director uniforme en toda la celda, adoptando el nemático la orientación que impone la superficie dominante. Por contra, si la intensidad del anchoring es similar, puede aparecer un estado llamado biaxial (ver fase B en la figura 1) que consiste en dos capas uniformes de nemático enfrentadas con el director perpendicular entre sí. Dicho estado ha sido predicho usando teoría Landau-de Gennes¹ y mediante simulaciones Monte Carlo². Hasta la fecha no se ha encontrado experimentalmente, si bien parece que existen evidencias³.

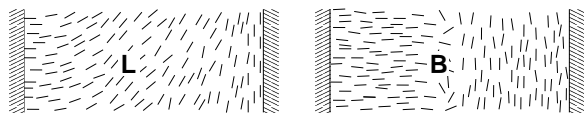


Figura 1. Esquema de dos de las posibles configuraciones que puede adoptar un cristal líquido confinado en una celda híbrida.

Nosotros hemos usado una teoría microscópica, basada en una extensión del funcional de la densidad propuesto por Onsager para estudiar esta configuración. Como modelo de cristal líquido se han utilizado esferocilindros duros y las superficies se han modelado vía un potencial externo.

En condiciones de estabilidad de la fase nemática y para anchos de celda reducidos tiene lugar una transición de primer orden entre un estado tipo *L* y otro de tipo *B*. Al desarrollar el diagrama de fases completo y estudiar el comportamiento de la fase biaxial (ver diagrama en figura 2), se observa como dicho estado es en realidad el isótropo de volumen. Cuando la anchura de la celda es de unas pocas dimensiones moleculares la región sin orden posicional queda limitada a una pequeña zona en el centro del poro. En estas circunstancias una simple inspección visual de los perfiles induce erróneamente a pensar que se trata de una fase nemática nueva.

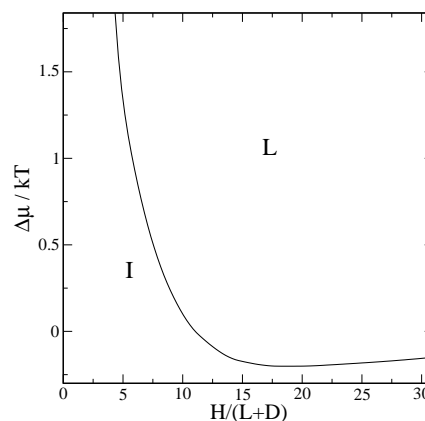


Figura 2. Diagrama de fases en el plano potencial químico-anchura del poro. El potencial químico está referido al de la coexistencia isótropo-nemático de volumen. *I* es la fase isótropa y *L* la nemática con el director rotado de forma lineal.

* daniel.delasheras-arroba-uam.es

¹ Por ejemplo, H.G. Galaboba et al., *Liq. Cryst.* **23**, 803 (1997).

² C. Chiccoli et al., *Phys. Rev. E* **67**, 50703 (2003).

³ B. Zappone et al., *Phys. Rev. E* **71**, 41703 (2005).