

## Diagrama de fases de un cristal líquido esméctico

E. Martín del Río<sup>1\*</sup> y E. de Miguel<sup>2</sup>

(1) Dto. de Ingeniería Eléctrica y Térmica, Escuela Politécnica Superior, Universidad de Huelva, 21819 Huelva

(2) Dto. de Física Aplicada, Facultad de Ciencias Experimentales, Universidad de Huelva, 21071 Huelva

Presentamos un estudio del diagrama de fases de un modelo de cristal líquido basado en una teoría del funcional de la densidad. Las interacciones moleculares consisten en una contribución repulsiva anisótropa (descrita por el modelo de solapamiento gaussiano) y un término atractivo isótropo (modelo de pozo cuadrado). Este modelo ha sido estudiado previamente para el caso de moléculas paralelas<sup>1,2</sup>.

En el funcional de la energía libre la contribución repulsiva se tiene en cuenta usando una descripción no local mientras que la interacción atractiva se incorpora usando una aproximación de campo medio.

Para ciertos valores de los parámetros moleculares el

modelo exhibe fases isotrópica, nemática y esméctica. La estabilización de la fase esméctica se debe a la interacción atractiva ya que el modelo puramente repulsivo no presenta fase esméctica. Analizamos el papel de los parámetros del potencial en el diagrama de fases y en la aparición de una fase nemática reentrante.

---

\* elvira@uhu.es

<sup>1</sup> E. Martín del Río y E. de Miguel, *Phy. Rev. E*, **72**, 051707 (2005)

<sup>2</sup> E. de Miguel y E. Martín del Río, *Phys. Rev. Lett.*, **95**, 217802 (2005)