Generalización del modelo de Berreman para la energía libre superficial de un cristal líquido nemático en presencia de un sustrato de dientes de sierra.

O. A. Rojas-Gómez^{*} y J. M. Romero-Enrique[†]

Departamento de Física Atómica, Molecular y Nuclear (Área de Física Teórica), Universidad de Sevilla, Apartado de Correos

1065 41080 Sevilla

La presencia de sustratos rugosos puede frustrar el orden orientacional de largo alcance que presentan los cristales líquidos nemáticos. Como consecuencia, la densidad de energía libre superficial de exceso del nemático en contacto con el sustrato tiene una contribución asociada a las distorsiones del campo de orden orientacional f_e . Si la rugosidad es periódica a lo largo de una dirección y con un vector de ondas q, Berreman propuso que, cuando la rugosidad es pequeña, dicha contribución tiene la forma $f_e \sim Kq(qA)^2/4$, siendo A la amplitud de la rugosidad y K una constante elástica^{1,2}. Trabajos posteriores extendieron sus argumentos para situaciones donde la rugosidad no era pequeña, encontrándose que, si el sustrato es suave, la contribución tiene la forma $Kq\chi(qA)$, siendo $\chi(x)$ una función que depende de la forma del sustrato pero no de sus dimensiones absolutas 3,4 .



FIG. 1. Representación esquemática de la geometría del problema

El escalamiento de la contribución elástica con q se rompe cuando consideramos sustratos que nuclean defectos topológicos. Un ejemplo es el sustrato en forma de dientes de sierra que favorece el anclaje homeotrópico⁵⁻⁷ (véase la Fig. 1). En este caso, f_e sigue la siguiente ley⁸:

$$f_e \approx -\frac{\mathcal{K}(\alpha)}{2\pi} q \ln \frac{q \cos \alpha}{\pi} + \frac{q}{2\pi} B(\alpha, w) \tag{1}$$

donde $\mathcal{K}(\alpha)$, dependiendo de si el nemático se orienta lejos del sustrato a lo largo del eje x (textura N^{\parallel}) o a lo largo del eje y (textura N^{\perp}), tiene la siguiente expresión:

$$\mathcal{K}(\alpha) = \frac{K\pi\alpha^2}{\left(\frac{\pi}{2}\right)^2 - \alpha^2} \quad \text{textura } N^\perp \\
= K\pi\frac{\frac{\pi}{2} - \alpha}{\frac{\pi}{2} + \alpha} \quad \text{textura } N^\parallel \quad (2)$$

El término $B(\alpha, w)$ tiene dos orígenes: las desviaciones del campo director nemático respecto al campo referencia correspondiente a los defectos nucleados en las singularidades del sustrato, y la contribución de los núcleos de los defectos⁸. Al comparar la predicción de la Ec. (1) con los resultados numéricos en el modelo de Landau-de Gennes, el acuerdo es excelente en condiciones de anclaje efectivo fuerte⁸ (véase Fig. 2). Discutiremos cómo estas ideas pueden generalizarse para sustratos de forma general.



FIG. 2. Comparación de los valores de $B(\alpha, w)$ predichos por la Ec. (1) y los obtenidos mediante minimización numérica del modelo de Landau-de Gennes.

- * oarojas@us.es
- † enrome@us.es
- ¹ D. W. Berreman, Phys. Rev. Lett. **28**, 1683 (1972)
- ² P.G. de Gennes and J. Prost, *The Physics of Liquid Crys*tals, 2nd ed. (Oxford University Press, Oxford, 1995)
- ³ G. Barbero, A.S. Gliozzi, M. Scalerandi and L.R. Evangelista, Phys. Rev. E **77**, 051703 (2008)
- ⁴ P. Patrício, N. M. Silvestre, C.-T. Pham and J. M. Romero-Enrique, Phys. Rev. E 84, 021701 (2011).
- ⁵ P. Patrício, C.-T. Pham and J. M. Romero-Enrique, Eur. Phys. J. E **26**, 97 (2008).
- ⁶ P. Patrício, J. M. Romero-Enrique, N. M. Silvestre, N. R. Bernardino and M. M. Telo da Gama, Mol. Phys. **109**, 1067 (2011).
- ⁷ J. M. Romero-Enrique, C.-T. Pham and P. Patrício, Phys. Rev. E **82**, 011707 (2010).
- ⁸ O. A. Rojas-Gómez and J. M. Romero-Enrique, enviado a Phys. Rev. E (2012); arXiv: cond-mat/1205.2906 (2012).