



Migawki organizacji molekularnej w dwóch niedawno odkrytych nematykach (od lewej do prawej): referencyjny jednoosiowy nematyk dla silnie polarnej cząsteczki RM734 (na dole); (hipotetyczna) ferroelektryczna faza nematyczna dla RM734; nematyk twist-bend (N_{TB}); szczegóły molekularnej konfiguracji dla cząsteczek CB7CB w fazie N_{TB} . Strzałki reprezentują molekularne momenty dipolowe.

Ciekłe kryształy nematyczne są orientacyjnie uporządkowanymi cieczami anizotropowymi bez długozasięgowego porządku translacyjnego. Środki mas molekuł są rozmieszczone losowo, nadając tym fazom płynność, ale porządek orientacyjny ma charakter długozasięgowy. Do niedawna znaliśmy tylko dwie rodziny nematyków: (1) nematyki jednoosiowe (N_U) i dwuosiowe dla niechiralnych materiałów ciekłokrystalicznych oraz (2) fazę cholesteryczną i fazy błękitne dla chiralnych ciekłych kryształów. Jednym z najbardziej spektakularnych ostatnio odkryć jest identyfikacja nowych faz nematycznych (NFN) o superstrukturze polarnej, należących do pierwszej rodziny. Zaczęło się w 2011 roku od odkrycia fazy helikonikalnej N_{TB} , mimo że mezogeny ją tworzące są achiralne (podobne do banana). Długozasięgowy, helikonikalny porządek orientacyjny pojawia się tutaj w skali 10 nm i stanowi unikalny w naturze przykład spontanicznego łamania symetrii zwierciadlanej bez jakiegokolwiek wsparcia ze strony (quasi-) dalekozasięgowego porządku translacyjnego. Następnie odkryty został nematyk splay-bend (N_{SB}) w koloidach banano-podobnych oraz w polu elektrycznym przyłożonym do fazy N_{TB} . Fazę tą można scharakteryzować jako spolaryzowaną liniowo periodyczną fałę naprzemiennych deformacji typu splay i bend uśrednionego porządku orientacyjnego. Ale w przeciwieństwie do N_{TB} , faza N_{SB} jest niechiralna i globalnie dwuosiowa. W ramach grantu OPUS 2013/11/B/ST3/04247 (data zakończenia: 2018-01-07) z powodzeniem zbadaliśmy te struktury, a najważniejsze wyniki wyjaśniające ich samoorganizację zostały opublikowane w PNAS, JPCC, Soft Matter oraz PRE Rapid Communication. Jednak całkiem niedawno (tj. w przeciągu ostatnich 2 lat) grupy doświadczalne z Unii Europejskiej oraz USA ogłosiły kolejne pionierskie odkrycia. Znalezione zostały antyferroelektryczny nematyk splay (N_S) i ferroelektryczny nematyk (N_F) dla mezogenów w kształcie klina z dużym elektrycznym momentem dipolowym (~ 11 D dla RM734), a także nematyk o symetrii jednoskośnej w materiałach hybrydowych złożonych z dyskopodobnych koloidów i zwyczajnych ciekłych kryształów nematycznych. Biorąc pod uwagę, że N_{TB} , N_{SB} , N_S , a zwłaszcza N_F , są polarnymi materiałami miękkimi, mają one potencjalną moc aby zmienić oblicze przyszłych technologii (np. jako części superszybkich, energooszczędnych wyświetlaczy elastycznych, elastycznych pamięci, superkondensatorów itp.). W wyniku tych odkryć NFN stały się niezwykle „gorącym” tematem badawczym, angażującym wiodące zespoły z USA, UE, Japonii i Chin. Ponieważ polarna i ogólnie orientacyjna samoorganizacja w nowych fazach nematycznych jest słabo poznana (być może z wyjątkiem N_{TB}), naszym celem jest dołączenie do tych badań przez opracowanie modeli mezoskopowych i mikroskopowych, które pozwolą skorelować obserwacje doświadczalne (obecne i przyszłe) z odpowiednimi cechami molekuł, lokalną symetrią oraz analizą makroskopową.

Bieżące doświadczenia sugerują, że stabilizację NFN można powiązać z obserwowanym silnym zmiękczeniem jednej z trzech stałych elastycznych Franka w sąsiedniej fazie N_U , w pobliżu przejścia do polarnego nematyka. To z kolei wydaje się zależeć od kształtu cząsteczek poprzez entropię upakowania i korelacji molekularnych dipoli. Zamierzamy dokładnie zbadać tę hipotezę. W szczególności chcielibyśmy zrozumieć dlaczego cząsteczki o silnych momentach dipolowych, takich jak RM734, wybierają w stanie ciekłym porządek ferroelektryczny zamiast bardziej korzystnych energetycznie antyrównoległych korelacji.

Opracowane zostaną modele, które zidentyfikują unikalne cechy struktury molekularnej odpowiedzialne za stabilizację N_F , N_S oraz powiązanych z nimi faz. Następnie, za pomocą formalizmu Funkcjonału Lokalnej Gęstości, uogólnionej teorii deGennes-Ginzburga-Landaua i symulacji komputerowych, wyznaczone zostaną diagramy fazowe i odpowiadające im przejścia fazowe. Pozwoli to scharakteryzować nowe fazy za pomocą odpowiednich parametrów porządku i przewidzieć ich właściwości. Badania te, a zwłaszcza zależność polaryzacji od temperatury i pola elektrycznego, może wskazać na potencjalnie nowe zastosowania technologiczne tych materiałów. Szczególnie ważne dla projektu będą symulacje komputerowe Monte-Carlo oraz Dynamiką Molekularną. Dostarczą one cennych informacji o korelacjach molekularnych, parametrach uporządkowania, dyfuzji itp. w polarnych fazach nematycznych i, jak mamy nadzieję, rzucą nowe światło na naturę wzajemnego oddziaływania między polaryzacją i kształtem molekuł. Pragniemy dodać, że zapotrzebowanie na modele i podstawowe zrozumienie jest tutaj nie tylko kwestią teoretyczną, lecz kluczowym warunkiem aby uzyskać dostęp do prawdziwego potencjału tych materiałów i ich dalszego rozwoju.