

SELF-ASSEMBLY OF DISCOTIC LIQUID CRYSTALS IN NANOPORES AS SEEN BY X-RAY DIFFRACTION AND MONTE CARLO COMPUTER SIMULATION

Zhuoqing Li¹, Kathrin Sentker¹, Arne Zantop², Milena Lippmann³, Oliver Seeck³, Andreas Schönhals⁴, Marco G. Mazza⁵, and Patrick Huber^{1,3}

¹ Institute for Materials and X-Ray Physics, Hamburg University of Technology, Germany

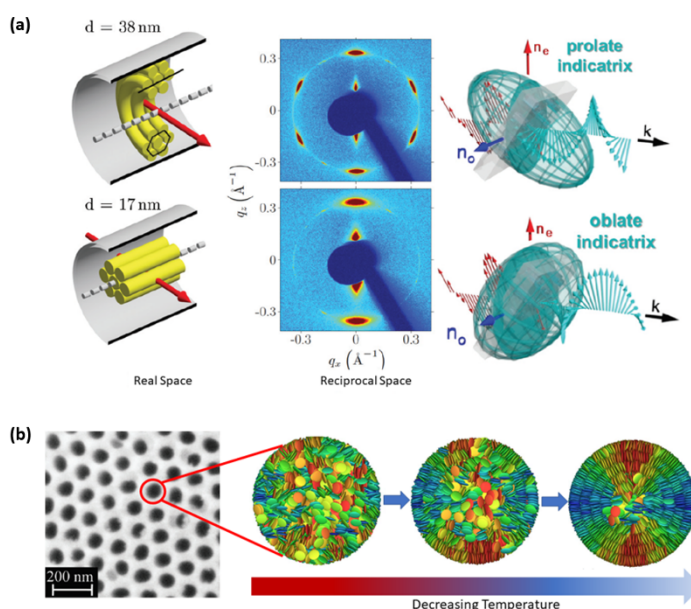
² Institut für Theoretische Physik, Technische Universität Berlin

³ Deutsches Elektronen-Synchrotron DESY

⁴ Bundesanstalt für Materialforschung und -prüfung, Berlin

⁵ Max Planck Institute for Dynamics and Self-Organization, Göttingen and Loughborough University, UK

Discotic liquid crystals (DLCs), often driven by the π - π interactions among their aromatic cores, may self-organize and stack up in columns, leading to a hexagonal ordered columnar liquid crystalline mesophase. Embedding of DLCs in nanoporous solids allows one to design hybrid materials with high charge carrier mobility on the single-nanopore scale and tailorable photonic properties [1, 2, 3]. (a) Self-assembly of DLCs into distinct columnar textures on the single-pore scale and the resulting polarisation state of light transmitted through the pore array. Self-assembly of radial aligned rings and axial aligned columns of discotic molecules on the single-pore scale, as evidenced by 2D X-ray diffraction, results in an either prolate or oblate ellipsoid of refractive indicatrix aligned to the pore axis direction. Thus, linear polarised light is split up by a parallel array of such pores into two beams with perpendicular polarisations and distinct propagation speeds. Their relative phase shift after passing the birefringent pore array is positive or negative, resulting in left- or right-hand elliptically polarised light, respectively, for the specific beam and membrane geometry. (b) Electron micrographs of porous anodized aluminium oxide membranes as host materials and radial Monte-Carlo simulation snapshots of DLCs confined in nanopores at decreasing temperature.



Los cristales líquidos discóticos (DLC, por sus siglas en inglés), a menudo guiados por las interacciones π - π de sus núcleos aromáticos, pueden autoorganizarse y apilarse en columnas, derivando en una mesofase de cristal líquido columnar hexagonal. La incrustación de DLC en sólidos nanoporosos permite el diseño de materiales híbridos con alta movilidad de portadores de carga a escala del nanoporo y propiedades fotónicas ajustables [1, 2, 3]. (a) Autoensamblado de DLC en distintas texturas columnares a escala del poro y el consiguiente estado de polarización de la luz transmitido a lo largo del conjunto de poros. El autoensamblado de anillos alineados radialmente y columnas de moléculas discóticas alineadas axialmente a escala del poro, tal y como lo evidencia la difracción de rayos X en 2D, resulta en un elipsoide oblongo o achatado de la indicatriz de refracción alineada con la dirección del eje del poro. Por lo tanto, la luz polarizada linealmente es dividida por un conjunto de poros paralelos en dos haces con polarizaciones perpendiculares y velocidades de propagación distintas. Su cambio de fase relativo después de pasar por el conjunto de poros birrefringente es positivo o negativo, lo que resulta en una luz polarizada elíptica hacia la derecha o hacia la izquierda, respectivamente, específicos del haz y de la geometría de la membrana. (b) Micrografías electrónicas de membranas porosas de óxido de aluminio anodizado como materiales hospedantes e imágenes radiales de simulaciones Monte Carlo de DLC confinados en nanoporos a temperatura decreciente.

1. Sentker K. *et al.* (2019). *Nanoscale*, 11(48):23304.

2. Sentker K. *et al.* (2018). *Phys. Rev. Lett.*, 120(6).

3. Gang O. *et al.* (2020). *Soft Matter and Biomaterials on the Nanoscale*. World Scientific.

Contact: Zhuoqing Li <zqli0721@gmail.com>