



Liquid crystal self-organization of colloids in complex environments

Auto-organisation de cristaux liquides colloïdaux en milieux complexes

Thèse de doctorat de l'université Paris-Saclay

École doctorale n° 564, physique de l'Ile-de-France (PIF) Spécialité de doctorat : Physique Graduate School : GS Physique. Référent : Faculté des sciences d'Orsay

Thèse préparée dans l'unité de recherche Université Paris-Saclay, CNRS, Laboratoire de Physique des Solides, 91405, Orsay, France, sous la direction de Rik WENSINK, Chargé de recherche CNRS.

Thèse soutenue à Paris-Saclay, le 30 juin 2023, par

Marina TORRES LÁZARO

Composition du jury

Membres du jury avec voix délibérative

Enrique VELASCO CARAVACAProfesseur, Autonomous University of Madrid

Hong XU Professeure, Université de Lorraine

Patrick DAVIDSON

Directeur de recherche, Université Paris-Saclay

Anja KUHNHOLD

Chercheuse postdoctorale, University of Freiburg

Rapporteur & Examinateur

Rapporteure & Examinatrice

Examinateur

Examinatrice

Titre: Auto-organisation de cristaux liquides colloïdaux en milieux complexes Mots clés: cristal liquide, colloïde, théorie d'Onsager, Hard Particle Monte Carlo

Résumé : Le travail présenté dans cette thèse se concentre sur une étude théorique de l'autoorganisation de cristaux liquides de bâtonnets ou de plaquettes colloïdales dans des milieux complexes. Les explorations sont faites par milieux d'une théorie statistique basée sur la théorie d'Onsager et la théorie du champ moyen, combinées à des simulations numériques à grande échelle. Le premier cas que nous considérons est celui de disques colloïdaux immergés dans des bâtonnets réversiblement polymérisables où les deux composants sont capables de développer l'ordre nématique. Nous établissons les diagrammes de phase qui présentent un certain nombre de coexistences multiphasiques et discutons le phénomène de polymérisation réversible dans des environnements antinématiques. Le deuxième exemple concerne des bâtonnets et des plaquettes colloïdales immergés dans un cristal liquide thermotrope chiral. Il est démontré que ces cristaux liquides hybrides moléculaires-colloïdaux présentent un ordre biaxial amélioré, une séparation de phase liquideliquide médiée par l'ancrage de surface et des organisations colloïdales-moléculaires hybrides bihélicoïdales exotiques à un contenu colloïdal significatif. Le dernier thème aborde l'auto-assemblage mésoscopique de bâtonnets colloïdaux chiraux mélangés à des polymères non absorbants. Selon les conditions, ces mélanges sont connus pour former des tactoïdes, des vaisseaux liquides en forme de membrane, ainsi que des rubans twistés. En utilisant la simulation informatique semi-grand canonique de Monte Carlo, nous abordons la morphologie et la structure interne de ces gouttelettes LC et nous comparons nos résultats avec des résultats expérimentaux récents sur des bâtonnets de virus fd filamenteux.

Title: Liquid crystal self-organization of colloids in complex environments **Keywords:** liquid crystal, colloid, Onsager theory, Hard Particle Monte Carlo

Abstract: The work presented in this thesis focuses on a theoretical study of liquid crystal (LC) self-organization of colloidal rods or platelets in complex environments. Explorations are made using statistical theory based on Onsager and mean-field theory combined with large-scale computer simulations. The first case we consider are colloidal discs immersed in reversibly polymerizing rods where both components are capable of developing nematic order. We map out the phase diagrams that feature a number of multi-phase coexistences and discuss the phenomenon of reversible polymerization in anti-nematic environments. The second example concerns colloid rods and platelets immersed in a chiral thermotropic liquid crys-

tal. These so-called hybrid molecular-colloidal liquid crystals are demonstrated to exhibit enhanced biaxial order, surface-anchoring mediated liquid-liquid phase separation, and exotic bi-helical hybrid colloidal-molecular organizations at significant colloid content. The last topic addresses the mesoscopic self-assembly of chiral colloidal rods mixed with non-adsorbing polymers. Depending on the conditions, these mixtures are known to form tactoids, membrane-shaped liquid rafts, as well as twisted ribbons. Using semi-grand canonical Monte Carlo computer simulation, we address the morphology and internal structure of these LC droplets and compare our findings with recent experimental results on filamentous fd virus rods.