

## بررسی پارامترهای کاملت - تافت و دما در بلورمایع نماتیکی ترکیبی ML-0688

### در فاز همسانگرد و ناهمسانگرد

بیبا طاهری، روشنک کیان، محمدصادق ذاکر حمیدی

دانشگاه تبریز، پژوهشکده فیزیک کاربردی و ستاره شناسی

#### چکیده

امروزه بلورهای مایع با ویژگی ساختاری منحصربفرد نقش مهمی در زمینه های مختلف علوم و فن آوری ایفا می کنند. به همین دلیل یافتن پارامترهای قطبیت حلالی بلورهای مایع به عنوان حلال برای بهبود عملکرد آنها از اهمیت بالایی برخوردار است. در این کار تجربی پارامترهای قطبیت حلالی با استفاده از روش طیف سنجی برای بلورمایع نماتیکی ترکیبی بدست آمده است. پارامترهای قطبیت حلالی مطالعه شده اثر محیط ناهمسانگرد بر روی رفتار فوتوفیزیکی مولکول های ماده حل شونده در فاز همسانگرد و ناهمسانگرد را بررسی می کند.

#### مقدمه

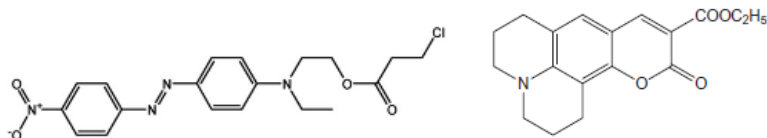
بلورهای مایع به موادی با ناهمسانگردی بالا اطلاق می شوند. این دسته از مواد به علت داشتن ویژگی های فیزیکی منحصربفرد نقش مهمی در زمینه های مختلف اپتیکی، صنعتی و پزشکی دارند [۱]. اطلاعات برهمکنشی بلورهای مایع به عنوان محیط حلالی بر روی ماده حل شونده اغلب به صورت قطبیت حلال بیان می شود. لذا بدست آوردن پارامترهای قطبیت حلالی محیط ناهمسانگرد برای بررسی رفتار فوتوفیزیکی ماده حل شونده به دلیل کاربردهای متنوع آنها حائز اهمیت است [۲-۴]. روش های مختلفی برای محاسبه پارامتر قطبیت حلالی ارائه شده که جامع ترین روش مقیاس حلالی چند پارامتری کاملت-تافت است که این مقیاس از رابطه ۱ تبعیت می کند:

$$v = v_0 + a\alpha + b\beta + s\pi^* \quad (1)$$

$\alpha$  قابلیت دهندگی پیوند هیدروژنی،  $\beta$  قابلیت گیرندگی پیوند هیدروژنی،  $\pi^*$  قطبش پذیری و دو قطبیدگی حلال و مقدار رگرسیون ماده حل شونده در حلال مرجع سیکلوهگزان است. ضرایب ثابت  $a$ ،  $b$  و  $s$  فرکانس جذب پارامترهای حلال اند. مقادیر مربوط به پارامترهای قطبیت حلالی با اندازه گیری طول موج بیشینه جذب رنگینه ها در محیط های حلالی به دست می آید [۵]. در این کار تجربی، پارامتر کاملت-تافت با استفاده از روش سولواتوکرومیک برای بلورمایع نماتیکی ترکیبی با ساختار نامشخص در فاز همسانگرد، ناحیه گذار فازی، فاز ناهمسانگرد و دماهای مختلف بدست آمده است.

#### مواد و روش ها

رنگینه های به کار رفته در این آزمایش، رنگینه کومارین ۵۰۴ و رنگینه DR<sub>II</sub> هستند. رنگینه کومارین ۵۰۴ (شکل ۱) از شرکت Sigma-Aldrich خریداری شده و رنگینه (شکل ۱) DR<sub>II</sub> در آزمایشگاه سنتز پژوهشکده فیزیک کاربردی و ستاره شناسی دانشگاه تبریز سنتز شده است. به دلیل واقع شدن طیف جذبی رنگینه های ۴-نیتروانیلین، N,N-دی اتیل-۴-نیتروانیلین در ناحیه فرابنفش و عدم امکان ادامه کار از رنگینه جایگزین DR<sub>II</sub> استفاده شده است. علاوه بر این، رنگینه ریچارد در بلورمایع ML-0688 قابل حل نبود و از رنگینه جایگزین کومارین ۵۰۴ استفاده شد. در این آزمایش بلورمایع نماتیکی ترکیبی با مشخصات (ML-0688,  $\Delta\epsilon=13.1$ ) LC-I با ثابت دی الکتریک مثبت استفاده گردید



شکل ۱: رنگینه کومارین ۵۰۴ و DR<sub>II</sub>

سلول مورد استفاده در آزمایشگاه ساخته شده و از طریق خاصیت موینگی بلورماید به داخل آن تزریق شده است. همچنین از دستگاه طیف سنج جذبی Shimadzu UV-2450 برای ثبت طیف های جذبی استفاده شد. مشخصات حلال های ناهمسانگرد استفاده شده در جدول ۱ آورده شده است.

جدول ۱: نام و مشخصات حلال های ناهمسانگرد به کار رفته شده

بلورماید	T <sub>C</sub> / °C	Δε	Δn
ML-0688	۷۷,۱	۱۳,۱	۰,۶۳

پارامترهای قطبیت حلالی کاملت-تافت با اندازه گیری طول موج بیشینه جذب رنگینه ها در حلال بدست می آید. رنگینه مناسب برای محاسبه پارامترهای β و π\* رنگینه DR<sub>II</sub> و رنگینه مورد استفاده برای محاسبه α و E<sub>T</sub>(30) رنگینه کومارین ۵۰۴ است که مقادیر مربوط با استفاده از این روابط (۲ تا ۹) بدست می آید [۳]:

$$\pi^* = \frac{V_{(N,N\text{-dimethyl-4-nitroaniline})} - 28.18}{-3.52} \quad (2)$$

$$V_{(N,N\text{-dimethyl-4-nitroaniline})} = 1.1965 v_{(DRII)} + 594.39R = 0.98 \quad (3)$$

$$\beta = \frac{0.9841 v_{(N,N\text{-dimethyl-4-nitroaniline})} - v_{(4\text{-nitroaniline})} + 3.49}{2.759} \quad (4)$$

$$v_{(4\text{-nitroaniline})} = 1.6897 v_{(DR2)} + -8402.4 = 0.95 \quad (5)$$

$$\alpha = \frac{E_T(30) - 14.6\pi^* - 30.31}{16.5} \quad (6)$$

$$E_T(30) = \frac{28591.5}{\lambda_{\max}(\text{Reichardt-betaine-dye})} \quad (7)$$

$$E_T^N = \frac{E_T(30)_{\text{Solvent}} - 30.7}{32.4} \quad (8)$$

$$v_{\text{Reichardt-betaine-dye}} = -7.48 v_{c504} + 188778.00, R^2 = 0.99 \quad (9)$$

## نتایج و بحث

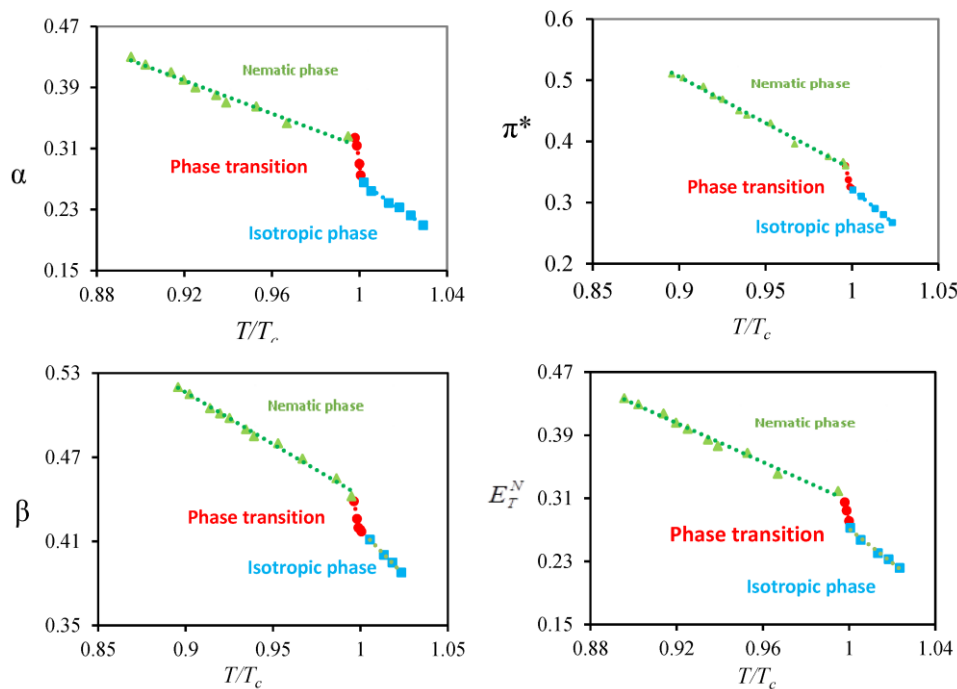
با اندازه گیری طول موج بیشینه جذب حاصل از نمودار طیف جذبی رنگینه های DR<sub>II</sub> و کومارین ۵۰۴ در بلورماید مورد بررسی، مقادیر مربوط به پارامترهای قطبیت حلالی در جدول ۲ آورده شده است.

جدول ۲: مقادیر مربوط به پارامترهای قطبیت حلالی بلورماید نماتیک در دمای اتاق

بلورماید	π*	B	α	E <sub>T</sub> (30)	E <sub>T</sub> <sup>N</sup>
ML-0688	۰,۵۵	۰,۵۴	۰,۱۹	۴۱,۱	۰,۳۳

همانطور که انتظار می رفت مقادیر π\* و β بلورماید در مقایسه با حلال های معمولی با ثابت دی الکتریک یکسان بیشتر است و مقادیر بزرگ مربوط به این پارامترها نشان دهنده قطبی بودن این محیط است و بنابراین، برهمکنش های قوی بین مولکول های بلورماید و مواد قطبی وجود دارد. با اینکه ساختار این بلورماید در دسترس نمی باشد ولی با

توجه به مقادیر بدست آمده برای پارامترهای قطبیت حلالی می توان پیش بینی کرد که این بلورمایع بررسی شده دارای گروه های گیرنده پیوند هیدروژنی قوی است. همچنین مقدار مربوط به پارامتر  $\alpha$  نشان دهنده این است که گروه های دهنده پیونده هیدروژنی بلور مایع ضعیف است. در ادامه کار، با اعمال دما و با اندازه گیری بیشینه طول موج طیف جذبی رنگینه های مرجع، قطبیت حلالی در بلورمایع به ازای دماهای مختلف، اثر تغییرات دمایی بر پارامترهای قطبیت حلالی بررسی گردید.



شکل ۲: اثر تغییرات دما بر پارامترهای قطبیت حلالی بلورمایع ML-0688

مطابق شکل (۲) با افزایش دما پارامترهای قطبیت حلالی کاهش یافته است و روند تغییرات پارامتر قطبیت حلالی در فاز نماتیک (ناهمسانگردی) نسبت به سایر قسمت های نمودار بسیار کند است. با افزایش دما در محدوده گذار فازی کاهش پارامتر قطبیت حلالی به طور ناگهانی و با سرعت زیادی انجام می گیرد که شیب نمودار ناحیه گذار فازی نسبت به شیب نمودار ناحیه نماتیکی و همسانگرد بیشتر است. با ادامه افزایش دما، کاهش پارامترهای قطبیت حلالی در ناحیه همسانگردی نیز مشاهده می شود که روند تغییرات پارامتر قطبیت حلالی در ناحیه همسانگرد نسبت به ناحیه گذار فازی کمتر و نسبت به فاز نماتیکی بیشتر است.

## نتیجه گیری

نتایج بدست آمده نشان دهنده برهمکنش های قوی بین مولکول های بلورمایع و رنگینه به صورت برهمکنش های میزبان-میهمان می باشد. با توجه به ساختار مولکولی بلورهای مایع و وجود گروه های گیرنده پیوند هیدروژنی و ساختار قطبی آن ها، مقادیر  $\pi^*$  و  $\beta$  بدست آمد.

## مرجع ها

- [۱] S. Chandrasekhar, "Liquid Crystals," Cambridge University Press, London, 1992.
- [۲] C. Reichardt, "Solvent and Solvent Effect in Organic Chemistry", Wiley, 2nd ed, 1988
- [۳] M.S. Zakerhamidi, H. Tajjali, M. Moghaddam, M. Jassas, R. Hosseini nasab, p. 337-341. Spectro chemical, Acta part A77, 2010.
- [۴] Carlos. Oliveira, Kerlleyp. Branco, Marricios. Baptista, Guiltorme, p. 2971-2982, Spectro chemical, Acta part A58, 2002.
- [۵] Marti Roses, Urma Buhvestov, Clara Rafols, Fernando Rired, Elisabet Bosch, J.chem, Soc, perkin Trans, 2, 1997