

بِسْمِ اللّٰهِ الرَّحْمٰنِ الرَّحِیْمِ

دانشکده علوم پایه  
گروه شیمی  
گرایش شیمی فیزیک

مطالعه خواص فوتوفیزیکی، ساختاری و تجمعی تعدادی از  
رنگینه‌ها در محیط‌های مایع و بلور مایع

از:

محمد محمد پور مقدم

استاد راهنما:

دکتر علی قنادزاده گیلانی

استادان مشاور:

دکتر حبیب تجلی، دکتر محمد صادق ذاکر حمیدی

آبان ۱۳۹۰

تقدیم به:

پدر و مادر عزیزم و همسر مهربانم

پیش از همه و فراتر از همه، خداوند متعال را شکر گزارم که همواره بهترین ها را برای این بنده حقیر در نظر داشته است

باشکر از خانواده عزیزم، پدر، مادر، همسر مهربانم که همواره مشوق و حامی ایجاب در تمامی مراحل زندگی بوده اند و زحمات و محبت ایشان فراتر از آن بوده که در قالب جملات امکان پاسکزاری از ایشان برایم فراهم باشد.

از استاد راهنمای ارجمند جناب آقای دکتر علی قنادزاده کیلانی پاسکزارم که همواره مورد لطف و محبت ایشان قرار داشته ام و از راهنمایی های ارزنده ایشان بهره مند بوده ام.  
از استادان مشاور کرامی جناب آقای دکتر حمید تجلی و دکتر محمد صادق ذاکر حمیدی که از مساعدت ارزنده ایشان بهره مند بوده ام، پاسکزارم.

از داوران محترم این رساله جناب آقای دکتر محمد حسین مجلس آرا، دکتر حمید ذم پناه و دکتر بهرام قلمی که زحمت داوری این رساله را بر عهده گرفتند، پاسکزارم  
از جناب آقای دکتر شهریار سعیدی مهرورز، نماینده محترم تحصیلات تکلیفی پاسکزارم.

پنجمین از کلیه دوستان و عزیزانی که در طول دوره دکتری از مساعدت ها و محبت ایشان بهره مند بوده ام و بویژه از دوست عزیزم آقای دکتر محمد صادق ذاکر حمیدی که همواره مورد لطف و محبت ایشان قرار داشته ام، پاسکزارم.

پنجمین از آقای حسینی و خانم مینای و فیروزی پاسکزارم که در طول این دوره از همکاری و لطف ایشان بهره مند بوده ام.

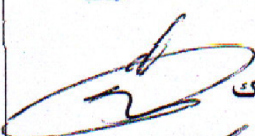
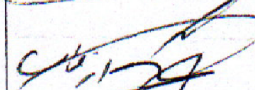


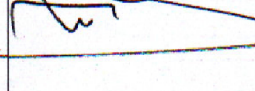
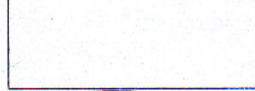
باسمه تعالی

صورتجلسه دفاع از رساله دکتری

با تأییدات الهی و با استعانت از حضرت ولی عصر "عج"، دفاع از پایان نامه رساله دکتری آقای محمد محمد پور مقدم در رشته شیمی گرایش شیمی فیزیک تحت عنوان "مطالعه خواص فوتوفیزیکی، ساختاری و تجمعی تعدادی از رنگینه ها در محیط های مایع و بلور مایع" به ارزش ۲۰ واحد، رأس ساعت ۱۰:۳۰ روز چهارشنبه ۹۰/۸/۴ در محل سالن سمینار ساختمان پنج طبقه دانشکده علوم پایه دانشگاه گیلان تشکیل گردید.

هیأت داوران به شرح زیر که قبلاً پایان نامه ایشان را مطالعه نموده اند، پس از استماع دفاعیات و پرسشهای لازم در زمینه علمی و تحقیقاتی ایشان، نتیجه را به شرح زیر اعلام می دارند:

پایان نامه نامبرده با نمره و با امتیاز عالی ، بسیار خوب ، خوب ، قابل قبول  مورد تأیید قرار گرفت.  
 پایان نامه در وضع فعلی با تصحیحات جزئی مورد قبول است و نامبرده نمره ۲۰ (بیست) و امتیاز عالی ، بسیار خوب ، خوب ، قابل قبول  دریافت نمود.  
 پایان نامه و پروژه به شکل فعلی، مورد تأیید قرار نگرفت و پیشنهاد شد که...

امضا	تخصص	مرتبۀ دانشگاهی	اعضای هیأت داوران
	شیمی فیزیک	استاد	استاد(ان) راهنما: ۱- آقای دکتر علی قنادزاده گیلانی
	فیزیک	استاد	استاد(ان) مشاور: ۱- آقای دکتر حبیب تجلی
	شیمی فیزیک	استادیار	۲- آقای دکتر محمد صادق ذاکر حمیدی
	فیزیک	استاد	استادان یا محققان مدعو ۱- آقای دکتر محمد حسین مجلس آرا
	شیمی فیزیک	استادیار	۲- آقای دکتر بهرام قلمی
	شیمی فیزیک	استادیار	۳- آقای دکتر حمید درمپناه

نماینده کمیته تحصیلات تکمیلی: آقای دکتر سعیدی مهرورز دانشیار بیولوژی

سه نسخه اصل از صورتجلسه توسط نماینده تحصیلات تکمیلی تنظیم و به مدیر گروه تسلیم می شود.  
یک نسخه در گروه آموزشی، یک نسخه در آموزش دانشکده و یک نسخه در اداره فارغ التحصیلان دانشگاه نگهداری خواهد شد.

ت	فهرست مطالب
ج	فهرست جدول‌ها
ح	فهرست شکل‌ها
د	چکیده فارسی
ذ	چکیده انگلیسی
	فصل اول
۲	۱-۱. مقدمه
۹	۲-۱. تئوری
۹	۱-۲-۱. سولواتو کرومیسم و بررسی تغییرات ممان دو قطبی از حالت پایه به نخستین حالت برانگیخته
۱۰	۱-۱-۲-۱. سولواتو کرومیسم
۱۰	۲-۱-۲-۱. انحلال
۱۲	۲-۲-۱. اثر حلال بر طیف جذبی و نشری
۱۶	۳-۲-۱. توصیف کمی اثر حلال بر طیف‌های جذبی و نشری ماوراء بنفش - مرئی
۲۸	۴-۲-۱. سولواتو کرومیسم و مقیاس‌های تجربی قطبیت حلال
۳۰	۱-۴-۲-۱. روابط انرژی آزاد خطی
۳۲	۵-۲-۱. پارامترهای تجربی قطبیت حلال بر مبنای اندازه‌گیری‌های طیف‌سنجی
۳۳	۱-۵-۲-۱. پارامترهای کاملت-تافت
۳۴	۱-۱-۵-۲-۱. مقیاس $\pi^*$
۳۵	۲-۱-۵-۲-۱. مقیاس‌های $\alpha$ و $\beta$
۳۶	۲-۵-۲-۱. مقیاس‌های قطبیت حلال $E_T(30)$ و $E_T^N$
۳۷	۶-۲-۱. همبستگی داده‌های طیفی با معادلات چند پارامتری قطبیت حلال
۳۸	۱-۶-۲-۱. معادله چند پارامتری کاملت-تافت
۳۹	۲-۶-۲-۱. معادله چند پارامتری کاتریتزکی
۴۰	۷-۲-۱. ویژگی‌های تجمعی رنگینه‌ها و برهم‌کنش‌های حل‌شونده-حل‌شونده
۴۱	۱-۷-۲-۱. توصیف کمی تعادل مونومر-دایمر
۴۲	۱-۱-۷-۲-۱. تعیین ثابت تعادل مونومر-دایمر: روش خطی
۴۳	۲-۱-۷-۲-۱. تعیین ثابت تعادل مونومر-دایمر: روش غیرخطی
۴۳	۸-۲-۱. میزبان ناهمسانگرد: بلور مایع
۴۵	۱-۸-۲-۱. نیروهای بین مولکولی در بلورهای مایع نماتیک
۴۶	۲-۸-۲-۱. پارامتر نظم
۴۸	۳-۸-۲-۱. تکنیک‌های طیف‌سنجی قطبشی
۴۸	۱-۳-۸-۲-۱. دو رنگ نمای خطی
۴۹	۴-۸-۲-۱. جهت‌دهی مولکول‌های بلور مایع
	فصل دوم
۵۱	۱-۲. مواد و روش‌ها
۵۱	۱-۱-۲. مواد میهمان: رنگینه‌های مورد بررسی

۵۴	۲-۱-۲. مواد میزبان: محیط‌های همسانگرد و ناهمسانگرد
۵۴	۲-۱-۲. ۱. میزبان همسانگرد
۵۵	۲-۱-۲. ۲. میزبان ناهمسانگرد
۵۸	۲-۲. روش‌ها
۵۸	۲-۲-۱. آماده‌سازی سل‌های بلور مایع با جهت‌گیری موازی
۵۹	۲-۲-۲. ابزارها و روش‌های مورد استفاده برای ثبت و پردازش داده‌های طیفی
۶۰	۲-۲-۲-۱. توسعه نوار ابزارهای اختصاصی برای محیط نرم‌افزار Excel
	فصل سوم
۷۳	۳-۱. بررسی رفتار طیفی رنگینه نیل‌رد در محیط‌های همسانگرد و ناهمسانگرد
۷۶	۳-۱-۱. استفاده از معادلات چندپارامتری قطبیت حلال برای رنگینه نیل‌رد
۷۸	۳-۱-۲. تغییرات ممان دوقطبی رنگینه نیل‌رد
۸۳	۳-۲. بررسی رفتار طیفی رنگینه اکسازین ۱ در محیط‌های همسانگرد و ناهمسانگرد
۷۶	۳-۲-۱. استفاده از معادلات چندپارامتری قطبیت حلال برای رنگینه اکسازین ۱
۸۸	۳-۲-۲. تغییرات ممان دوقطبی رنگینه اکسازین ۱
۹۲	۳-۲-۳. بررسی ویژگی‌های تجمعی رنگینه اکسازین ۱
۹۴	۳-۳. بررسی رفتار طیفی رنگینه‌های بریلیانت کرزیل‌بلو و نیل‌بلو در محیط‌های همسانگرد
۹۵	۳-۳-۱. استفاده از معادلات چندپارامتری قطبیت حلال برای رنگینه‌های بریلیانت کرزیل‌بلو و نیل‌بلو
۹۹	۳-۳-۲. تغییرات ممان دوقطبی رنگینه‌های بریلیانت کرزیل‌بلو و نیل‌بلو
۱۰۲	۳-۳-۳. بررسی ویژگی‌های تجمعی رنگینه‌های بریلیانت کرزیل‌بلو و نیل‌بلو
۱۰۴	۳-۴. بررسی رفتار طیفی رنگینه‌های کومارین ۴۴۰ و ۴۶۰ در محیط‌های همسانگرد و ناهمسانگرد
۱۰۹	۳-۴-۱. تغییرات ممان دوقطبی رنگینه‌های کومارین ۴۴۰ و کومارین ۴۶۰
۱۱۱	۳-۵. بررسی رفتار رنگینه‌های کومارین ۵۰۰ و ۵۰۳ در محیط‌های همسانگرد و ناهمسانگرد
۱۱۵	۳-۵-۱. تغییرات ممان دوقطبی رنگینه‌های کومارین ۵۰۰ و کومارین ۵۰۳
۱۱۹	۳-۶. بررسی رفتار رنگینه بنزوتیازول‌هیدروکسی کوئینولین در محیط‌های همسانگرد و ناهمسانگرد
۱۲۴	۳-۶-۱. استفاده از معادلات چندپارامتری قطبیت حلال برای رنگینه‌های بنزوتیازول‌هیدروکسی کوئینولین
۱۳۱	۳-۶-۲. دورنگ‌نمایی خطی و پارامتر نظم رنگینه‌های بنزوتیازول‌هیدروکسی کوئینولین
۱۳۴	۳-۷. بررسی رفتار رنگینه‌های آنتراکوئینون در محیط‌های همسانگرد
۱۳۹	۳-۷-۱. استفاده از معادلات چندپارامتری قطبیت حلال برای رنگینه‌های آنتراکوئینون
۱۴۱	۳-۷-۲. تغییرات ممان دوقطبی رنگینه‌های آنتراکوئینون
	فصل چهارم
۱۴۵	۴-۱. بحث و نتیجه‌گیری
۱۵۱	۴-۲. پیشنهاد برای کارهای آینده
۱۵۳	مراجع
۱۶۱	ضمائم

۱۱	جدول ۱-۱ ارتباط میان قطبیت و حلالیت
۳۳	جدول ۱-۲ مشخصات برخی از مقیاس‌های طیف سنجی قطبیت حلال
۳۵	جدول ۱-۳ مقادیر پارامترهای قطبیت برخی حلال‌های متداول
۵۲	جدول ۱-۲ ساختار مولکولی رنگینه‌های مورد مطالعه
۵۵	جدول ۲-۲ ساختار مولکولی بلورهای مایع مورد استفاده
۶۲	جدول ۲-۳ مجموعه افزونه‌های ارائه شده به همراه قابلیت‌های مربوط
۶۹	جدول ۲-۴ مقایسه نتایج حاصل از روش‌های مختلف بررسی طیف‌های تعادل مونومر-دایمر
۷۵	جدول ۱-۳ پارامترهای طیفی نیل‌رد در محیط‌های حلالی مختلف
۷۵	جدول ۲-۳ پارامترهای طیفی نیل‌رد در محیط بلورهای مایع
۷۷	جدول ۳-۳ ضرایب بدست آمده از تحلیل داده‌های طیفی با معادلات چندپارامتری کاتریتزکی و کاملت-عبد-تافت
۷۸	جدول ۳-۴ درصد مشارکت برهم کنش‌ها مربوط به معادلات کاتریتزکی و کاملت-عبد-تافت در محیط حلال‌های همسانگرد
۷۹	جدول ۳-۵ تغییرات ممان دوقطبی رنگینه نیل‌رد ضمن انتقال الکترونی
۸۱	جدول ۳-۶ تغییرات ممان دوقطبی رنگینه نیل‌رد ضمن انتقال الکترونی (ممان دوقطبی حالت پایه برابر با ۷/۹۷ دبای)
۸۵	جدول ۳-۷ پارامترهای طیفی اکسازین ۱ در محیط‌های حلالی مختلف
۸۶	جدول ۳-۸ پارامترهای طیفی اکسازین ۱ در محیط بلورهای مایع
۸۶	جدول ۳-۹ ضرایب بدست آمده از تحلیل داده‌های طیفی با معادلات چندپارامتری کاتریتزکی و کاملت-عبد-تافت
۸۸	جدول ۳-۱۰ تغییرات ممان دوقطبی رنگینه اکسازین ۱ ضمن انتقال الکترونی
۸۹	جدول ۳-۱۱ تغییرات ممان دوقطبی رنگینه اکسازین ۱ ضمن انتقال الکترونی (ممان دوقطبی حالت پایه برابر با ۱/۷ دبای)
۹۱	جدول ۳-۱۲ تغییرات ممان دوقطبی رنگینه اکسازین ۱ ضمن انتقال الکترونی در محیط شامل بلور مایع
۹۳	جدول ۳-۱۳ پارامترهای اکسایتونی محاسبه شده برای رنگینه اکسازین ۱ در محیط آبی
۹۵	جدول ۳-۱۴ پارامترهای قطبیت حلال‌های مختلف
۹۶	جدول ۳-۱۵ پارامترهای طیفی رنگینه‌های بریلیانت کرزیل بلو و نیل بلو
۹۷	جدول ۳-۱۶ داده‌های حاصل معادلات چندپارامتری کاتریتزکی و کاملت-عبد-تافت برای رنگینه بریلیانت کرزیل بلو
۹۷	جدول ۳-۱۷ داده‌های حاصل معادلات چندپارامتری کاتریتزکی و کاملت-عبد-تافت برای رنگینه نیل بلو
۹۸	جدول ۳-۱۸ درصد مشارکت برهم کنش‌ها مربوط به معادلات کاتریتزکی و کاملت-عبد-تافت برای رنگینه بریلیانت کرزیل بلو
۹۸	جدول ۳-۱۹ درصد مشارکت برهم کنش‌ها مربوط به معادلات کاتریتزکی و کاملت-عبد-تافت برای رنگینه نیل بلو
۱۰۱	جدول ۳-۲۰ تغییرات ممان دوقطبی رنگینه‌های بریلیانت کرزیل بلو و نیل بلو ضمن انتقال الکترونی
۱۰۱	جدول ۳-۲۱ تغییرات ممان دوقطبی رنگینه‌های بریلیانت کرزیل بلو و نیل بلو ضمن انتقال الکترونی
۱۰۳	جدول ۳-۲۲ پارامترهای اکسایتونی محاسبه شده برای رنگینه‌های بریلیانت کرزیل بلو و نیل بلو
۱۰۶	جدول ۳-۲۳ پارامترهای فیزیکی حلال‌های همسانگرد و ناهمسانگرد
۱۰۷	جدول ۳-۲۴ پارامترهای طیفی رنگینه کومارین ۴۴۰ در حلال‌های همسانگرد و ناهمسانگرد
۱۰۷	جدول ۳-۲۵ پارامترهای طیفی رنگینه کومارین ۴۶۰ در حلال‌های همسانگرد و ناهمسانگرد
۱۰۹	جدول ۳-۲۶ تغییرات ممان دوقطبی رنگینه‌های کومارین ۴۴۰ و ۴۶۰ ضمن انتقال الکترونی
۱۱۳	جدول ۳-۲۷ پارامترهای فیزیکی حلال‌های همسانگرد و ناهمسانگرد
۱۱۴	جدول ۳-۲۸ پارامترهای طیفی رنگینه کومارین ۵۰۰ در حلال‌های همسانگرد و ناهمسانگرد



- جدول ۲۹-۳ پارامترهای طیفی رنگینه کومارین ۵۰۳ در حلال‌های همسانگرد و ناهمسانگرد ۱۱۴
- جدول ۳۰-۳ تغییرات ممان دوقطبی رنگینه‌های کومارین ۵۰۰ و ۵۰۳ ضمن انتقال الکترونی ۱۱۶
- جدول ۳۱-۳ مشخصه‌های رنگینه‌های بنزوتیازول هیدروکسی کوئینولین ۱۱۹
- جدول ۳۲-۳ حلال‌های همسانگرد مورد استفاده در مطالعه رنگینه‌های بنزوتیازول هیدروکسی کوئینولین ۱۲۰
- جدول ۳۳-۳ مشخصه‌های طیف‌های جذبی و نشری رنگینه‌های بنزوتیازول هیدروکسی کوئینولین ۱۲۳
- جدول ۳۴-۳ ضرایب معادلات چندپارامتری کاتریتزکی و کاملت-عبد-تافت بنزوتیازول هیدروکسی کوئینولین ۱۲۵
- جدول ۳۵-۳ ضرایب معادلات چندپارامتری کاتریتزکی و کاملت-عبد-تافت نیترو-بنزوتیازول هیدروکسی کوئینولین ۱۲۵
- جدول ۳۶-۳ ضرایب معادلات چندپارامتری کاتریتزکی و کاملت-عبد-تافت متوکسی-بنزوتیازول هیدروکسی کوئینولین ۱۲۶
- جدول ۳۷-۳ درصد مشارکت انواع برهم‌کنش‌ها مربوط به معادله کاملت-عبد-تافت در محیط حلال‌های همسانگرد ۱۲۸
- جدول ۳۸-۳ درصد مشارکت انواع برهم‌کنش‌ها مربوط به معادله کاتریتزکی در محیط حلال‌های همسانگرد ۱۲۸
- جدول ۳۹-۳ داده‌های طیفی رنگینه‌های بنزوتیازول هیدروکسی کوئینولین در محیط ناهمسانگرد ۱۲۹
- جدول ۴۰-۳ نسبت دورنگ‌نمایی و میزان ناهمسانگردی رنگینه‌های بنزوتیازول هیدروکسی کوئینولین در محیط ناهمسانگرد ۱۳۱
- جدول ۴۱-۳ پارامترهای فیزیکی حلال‌های همسانگرد ۱۳۳
- جدول ۴۲-۳ پارامترهای طیفی رنگینه سولونت گرین ۳ در حلال‌های همسانگرد ۱۳۶
- جدول ۴۳-۳ پارامترهای طیفی رنگینه سولونت بلو ۳۵ در حلال‌های همسانگرد ۱۳۶
- جدول ۴۴-۳ پارامترهای طیفی رنگینه سولونت بلو ۵۹ در حلال‌های همسانگرد ۱۳۶
- جدول ۴۵-۳ ضرایب معادله چند پارامتری کاملت-عبد-تافت برای رنگینه‌های آنتراکوئینون در حلال‌های همسانگرد ۱۳۹
- جدول ۴۶-۳ درصد مشارکت پارامترها برای رنگینه‌های آنتراکوئینون در حلال‌های همسانگرد ۱۴۰
- جدول ۴۷-۳ تغییرات ممان دوقطبی رنگینه‌های آنتراکوئینون ضمن انتقال الکترونی ۱۴۱
- جدول ۱-۴ پارامترهای تجمعی رنگینه‌های اکسازین ۱۴۶

- شکل ۱-۱ طرح کلی انتقالات ترازهای انرژی الکترونی ۱۳
- شکل ۱-۲ اثر سولواتو کرومیسم روی ترازهای انرژی الکترونی الف: سولواتو کرومیسم مثبت، ب: سولواتو کرومیسم منفی ۱۴
- شکل ۱-۳ اثر تجدید آرایش مولکول‌های حلال بر ترازهای انرژی الکترونی ۱۵
- شکل ۱-۴ توزیع آماری جهت‌گیری مولکولی در فاز نماتیک ۴۶
- شکل ۱-۵ تغییرات پارامتر نظم نسبت به دما ۴۷
- شکل ۱-۶ جهت‌گیری بردارهای محور مولکولی، جهت‌دهنده و ممان انتقالی ۴۸
- شکل ۱-۷ شمای جهت‌گیری صفحه‌ای و هوموتروپیک ۵۰
- شکل ۲-۱ تهیه سل بلور مایع با جهت‌گیری موازی ۵۸
- شکل ۲-۲ طرح میکروسکوپ پلاریزان و نحوه تأیید جهت‌گیری در سل بلور مایع با جهت‌گیری صفحه‌ای ۵۹
- شکل ۲-۳ محیط ویرایشگر Microsoft visual basic ۶۱
- شکل ۲-۴ الگوریتم ارائه‌شده جهت بررسی تعادل مونومر-دیمر به روش خطی و غیرخطی ۶۵
- شکل ۲-۵ الف) افزونه Decom در حال پردازش داده‌ها و ب) برگه خروجی حاوی نتایج بدست آمده ۶۷
- شکل ۲-۶ فرم افزونه Decom ۶۸
- شکل ۲-۷ الف) ضریب جذب مولی بر حسب  $\alpha$  و ب) طیف‌های تجربی و تئوری (ACRIDINE ORANGE) ۶۹
- شکل ۲-۸ تعیین ثابت تعادل بهینه با استفاده از افزونه Decom (ACRIDINE ORANGE) ۷۰
- شکل ۲-۹ طیف‌های تفکیک‌شده مونومر و دیمر (ACRIDINE ORANGE) ۷۰
- شکل ۲-۱۰ طیف‌های تفکیک‌شده مونومر و دیمر با استفاده از روش‌های مختلف (ACRIDINE ORANGE) ۷۱
- شکل ۲-۱۱ روند تغییر غلظت گونه‌های مونومر و دیمر (ACRIDINE ORANGE) ۷۱
- شکل ۳-۱ طیف جذبی و نشری نیل‌رد در حلال‌های همسانگرد الف) (۱) استون، (۲) اتانول ب) ناهمسانگرد (۱) 6CHBT، (۲) 7CP7BOC و (۳) 1B-1294 ۷۴
- شکل ۳-۲ همبستگی داده‌های طیفی با معادلات توابع قطبیت در الف) مجموعه انتخابی از حلال‌های همسانگرد ب) مجموعه انتخابی از حلال‌های ناهمسانگرد ۸۰
- شکل ۳-۳ ساختار رزونانسی مربوط به انتقال بار درون مولکولی رنگینه نیل‌رد ۸۱
- شکل ۳-۴ طیف جذبی و نشری اکسازین ۱ در حلال‌های الف) بنزن ب) دی‌متیل سولفوکسید (DMSO) ۸۴
- شکل ۳-۵ طیف جذبی و نشری اکسازین ۱ در مخلوط‌های بلور مایع نماتیک الف) 1B-1294 ب) 1751 ۸۵
- شکل ۳-۶ همبستگی داده‌های طیفی با معادلات توابع قطبیت در الف) دسته اول حلال‌ها ب) دسته دوم حلال‌ها ۹۰
- شکل ۳-۷ ساختار رزونانسی و جهت‌گیری ممان دوقطبی رنگینه اکسازین ۱ ۹۱
- شکل ۳-۸ طیف‌های جذبی رنگینه اکسازین ۱ در محیط آبی در محدوده غلظت  $10^{-7}$  مولار تا  $10^{-3}$  مولار ۹۲
- شکل ۳-۹ تغییرات  $ssresid$  بر حسب  $\log K_d$  برای رنگینه اکسازین ۱ در محیط آبی ۹۲
- شکل ۳-۱۰ تغییرات غلظت مونومر و دیمر بر حسب غلظت کل برای رنگینه اکسازین ۱ در محیط آبی ۹۳
- شکل ۳-۱۱ طیف جذبی مونومر و دیمر برای رنگینه اکسازین ۱ در محیط آبی ۹۳
- شکل ۳-۱۲ طیف جذبی و نشری الف) بریلانت کرزیل بلو ب) نیل‌بلو در حلال‌های الف) 1،4-دیاکسان (۲) دی‌متیل سولفوکسید ۹۴
- شکل ۳-۱۳ همبستگی داده‌های طیفی با معادلات توابع قطبیت برای رنگینه‌های الف) بریلانت کرزیل بلو و ب) نیل‌بلو ۱۰۰
- شکل ۳-۱۴ ساختار رزونانسی مربوط به رنگینه‌های الف) بریلانت کرزیل بلو و ب) نیل‌بلو ۱۰۱

- شکل ۳-۱۵ طیف‌های جذبی رنگینه‌های الف) بریلیانت کرزیل‌بلو در محدوده غلظت (A) ۲ میکرو مولار تا (B) ۱۰۰۰ میکرو مولار و  
 (ب) نیل‌بلو در محدوده غلظت (A) ۲ میکرو مولار تا (B) ۵۰۰ میکرو مولار در محیط آبی ۱۰۲
- شکل ۳-۱۶ طیف جذبی مونومر و دایمر رنگینه‌های الف) بریلیانت کرزیل‌بلو و (ب) نیل‌بلو در محیط آبی ۱۰۳
- شکل ۳-۱۷ طیف جذبی و نشری الف) کومارین ۴۴۰ و (ب) کومارین ۴۶۰ در حلال‌های همسانگرد ۱۰۵
- شکل ۳-۱۸ نمودار جابجایی استوکس بر حسب قطبش‌پذیری جهتی حلال الف) کومارین ۴۴۰ و (ب) کومارین ۴۶۰ ۱۰۸
- شکل ۳-۱۹ طیف جذبی و نشری الف) کومارین ۵۰۰ و (ب) کومارین ۵۰۳ در حلال‌های همسانگرد ۱۱۲
- شکل ۳-۲۰ نمودار پارامترهای طیفی بر حسب توابع قطبیت حلال برای رنگینه کومارین ۵۰۰ ۱۱۶
- شکل ۳-۲۱ نمودار پارامترهای طیفی بر حسب توابع قطبیت حلال برای رنگینه کومارین ۵۰۳ ۱۱۷
- شما ۳-۱ مراحل سنتز رنگینه‌های بنزوتیازول هیدروکسی کوئینولین ۱۱۹
- شکل ۳-۲۲ طیف جذبی رنگینه‌های بنزوتیازول هیدروکسی کوئینولین در (۱) سیکلو‌هگزان (۲) بنزن (۳) استون (۴) دی‌متیل سولفوکسید  
 (۵) بنزیل الکل (۶) استونیتریل (۷) متانول (۸) دی‌متیل فرم‌آمید ۱۲۲
- شکل ۳-۲۳ تعادل توتومری آزو-هیدرازون رنگینه بنزوتیازول هیدروکسی کوئینولین ۱۲۳
- شکل ۳-۲۴ طیف نشری رنگینه‌های بنزوتیازول هیدروکسی کوئینولین در الف) اتانول (ب) ۱-بوتانول ۱۲۳
- شکل ۳-۲۵ نواحی مختلف طیف جذبی رنگینه بنزوتیازول هیدروکسی کوئینولین ۱۲۷
- شکل ۳-۲۶ طیف جذبی رنگینه‌های الف) بنزوتیازول هیدروکسی کوئینولین (ب) نیترو- بنزوتیازول هیدروکسی کوئینولین و (ج)  
 متوکسی- بنزوتیازول هیدروکسی کوئینولین در (۱) مخلوط نماتیک E7، مخلوط نماتیک (۱۷۵۱، ۳) 8CB، (۴) 6CHBT، (۵)  
 5CB و (۶) FME4N ۱۳۰
- شکل ۳-۲۷ طیف جذبی قطبشی رنگینه‌های الف) بنزوتیازول هیدروکسی کوئینولین (ب) نیترو- بنزوتیازول هیدروکسی کوئینولین و  
 (ج) متوکسی- بنزوتیازول هیدروکسی کوئینولین در بلور مایع 5CB ۱۳۲
- شکل ۳-۲۸ طیف جذبی و نشری رنگینه‌های آنتراکوئینون الف) سولونت گرین ۳، (ب) سولونت بلو ۳۵ (ج) سولونت بلو ۵۹ ۱۳۵
- شکل ۳-۲۹ نمودار  $\Delta V$  بر حسب  $f(\epsilon, n)$  رنگینه‌های الف) سولونت گرین ۳، (ب) سولونت بلو ۳۵، (ج) سولونت بلو ۵۹ ۱۳۸
- شکل ۳-۳۰ ساختارهای رزونانسی آنتراکوئینون‌ها در محیط حلال‌های کم‌قطبی و قطبی ۱۴۰
- شکل ۳-۳۱ نمودار  $V_a + V_f$  بر حسب  $f(\epsilon, n) + 2g(n)$  رنگینه‌های الف) سولونت گرین ۳، (ب) سولونت بلو ۳۵، (ج) سولونت-  
 بلو ۵۹ ۱۴۲
- شکل ۴-۱ رنگینه‌های اکسازین ۱۴۵
- شکل ۴-۲ رنگینه‌های کومارین ۱۴۷
- شکل ۴-۳ انتقال بار درون مولکولی رنگینه‌های کومارین ۱۴۷
- شکل ۴-۴ توتومری آزو-هیدرازون در رنگینه‌های بنزوتیازول هیدروکسی کوئینولین ۱۴۸
- شکل ۴-۵ ساختارهای رزونانسی آنتراکوئینون‌ها در محیط حلال‌های کم‌قطبی و قطبی ۱۴۹

## مطالعه خواص فوتوفیزیکی، ساختاری و تجمعی تعدادی از رنگینه‌ها در محیط‌های مایع و بلور مایع

محمد محمد پور مقدم

خواص فوتوفیزیکی، ساختاری و تجمعی تعدادی از رنگینه‌های لیزری و غیر لیزری بر مبنای رفتار سولواتوکرومیک جذبی و نشری در محیط‌های مایع و بلور مایع مورد ارزیابی قرار گرفته است. بدین منظور داده‌های طیفی تعدادی از رنگینه‌ها از خانواده‌های اکسازین، کومارین، آزو و آنتراکوئینون در محیط حلال‌های مایع و بلور مایع بررسی شده و ساختار طیف‌های ثبت شده بطور کیفی مورد مطالعه قرار گرفته است. در هر مورد بر مبنای ویژگی‌های رنگینه و متغیر مورد ارزیابی از روش‌های محاسباتی مناسب جهت بررسی کمی ماهیت و میزان برهم‌کنش‌های بین اجزاء مولکولی استفاده گردید. اثرات محیط‌های حلالی مایع و بلور مایع بر تغییرات ممان دوقطبی بر مبنای رفتار سولواتوکرومیک رنگینه‌ها مورد ارزیابی قرار گرفت. بعلاوه تحلیل میزان همبستگی داده‌های تجربی با معادلات چندپارامتری قطبیت حلال، جهت درک بهتر برهم‌کنش‌های بین حلال و حل‌شونده بکار برده شد. همچنین ویژگی‌های تجمعی تعدادی از رنگینه‌های یونی اکسازین مورد مطالعه قرار گرفت. از نتایج بدست آمده برای هر دسته از رنگینه‌ها، جهت تعیین رابطه بین ویژگی‌های ساختاری میزان و میهمان با ویژگی‌های فوتوفیزیکی رنگینه، و میزان کارایی و دقت روش‌های بکار رفته در تجزیه و تحلیل و تعیین انواع برهم‌کنش‌ها برای محیط‌های حلالی مختلف و به‌ویژه در محیط بلور مایع استفاده گردید.

کلید واژه‌ها: اکسازین‌ها، کومارین‌ها، رنگینه‌های آزو، بلورهای مایع، ممان دوقطبی، مقیاس‌های چندپارامتری قطبیت حلال، تجمع مولکولی، انتقال بار درون مولکولی، توتومری آزو-هیدرازون

# مقدمه و تئوری

## ۱-۱. مقدمه

بواسطه ویژگی‌های ذاتی مواد و واکنش‌های شیمیایی، تنها بخش کوچکی از مجموعه واکنش‌های شناخته شده در فاز گازی مورد بررسی و مطالعه قرار گرفته‌اند. علیرغم توصیف آسان‌تر واکنش‌های شیمیایی در فاز گازی، بخش اعظم مطالعات انجام شده، در محیط یک میزبان و بطور خاص در فاز مایع صورت گرفته‌اند. جدا از بحث بررسی‌های آزمایشگاهی، تقریباً تمامی فرایندهای زیست شیمیایی و بخش اصلی فرایندهای شیمیایی صنعتی در محیط میزبانی یک حلال مایع صورت می‌گیرند. در دهه‌های اخیر بررسی‌های فراوانی جهت شناسایی، دسته‌بندی و توصیف نظری اثرات محیط میزبان<sup>۱</sup> بر ویژگی‌های مختلف مواد میزبان انجام شده است. در این راستا محققین همواره در تلاش بوده‌اند تا میزان تاثیرگذاری محیط میزبان بر ویژگی‌های اختصاصی یک گونه خاص و یا بر مجموعه فرایندهای یک واکنش را مورد ارزیابی قرار دهند. از جمله ویژگی‌های فیزیکی-شیمیایی مورد نظر برای یک گونه خاص می‌توان به ویژگی‌های طیفی مربوط به انتقالات الکترونی، مادون قرمز و ...، تعادل بین ساختارهای توتومری، تعادل بین گونه‌های تجمع یافته اشاره نمود. در زمینه مجموعه فرایندهای مؤثر در یک واکنش نیز تأثیر محیط بر مواد اولیه، کمپلکس فعال شده، محصولات، حدواسطها و بطور کلی بر ویژگی‌های سینتیکی و ترمودینامیکی واکنش‌ها همواره مورد توجه شیمیدانان بوده است [۱، ۲].

علیرغم طیف وسیع مطالعات انجام شده در زمینه بررسی اثر محیط، همواره بواسطه نیاز به تعیین دقیق ماهیت برهم کنش‌های میهمان-میزبان<sup>۲</sup> و نیز تعیین میزان کمی این برهم کنش‌ها تمایل بسیاری برای انجام مطالعات جدیدتر در این عرصه وجود دارد. از جمله مهمترین زمینه‌های مورد توجه در این حیطه بررسی اثرات میزبان بر خواص فوتوفیزیکی، ساختاری و تجمعی رنگینه‌ها<sup>۳</sup> می‌باشد. رنگینه‌ها مجموعه‌ای از ترکیبات استخراج شده و یا سنتزی می‌باشند که برخی از انتقالات الکترونی آنها در ناحیه مرئی طیف الکترومغناطیس قرار می‌گیرند و در نتیجه ترکیباتی رنگی می‌باشند. این ترکیبات در سال‌های اخیر بطور فزاینده‌ای مورد توجه قرار گرفته‌اند. علت اصلی چنین رویکردی کاربردهای گسترده و روز افزون این ترکیبات در بخش‌های مختلف علوم از جمله شیمی، زیست شناسی، فیزیک، اپتیک<sup>۴</sup> و اپتو-الکترونیک<sup>۵</sup> می‌باشد. با پیشرفت‌های حاصل شده در زمینه شناخت و بهینه‌سازی خواص رنگینه‌ها، این ترکیبات عموماً جنبه تجاری و صنعتی می‌یابند. رنگینه‌ها علاوه بر کاربرد ذاتیشان به عنوان عوامل رنگ‌دهنده<sup>۶</sup> به

- 
1. Host
  2. Guest-host interactions
  3. Dyes
  4. Optics
  5. Opto-electronics
  6. Colorant

محیط میزبان و یا عامل رنگ کننده بستری<sup>۱</sup> که بر آن نشانده شده‌اند، به عنوان عامل رنگ کننده اختصاصی اجزاء سلولی و بافت‌های زیستی، عامل ردیاب<sup>۲</sup> در حسگرها، عامل فعال فلورسانسی در لیزرهای رنگی<sup>۳</sup> و به عنوان جزء حساس به نور<sup>۴</sup> در کاربردهای اپتیکی و اپتو-الکترونیکی بکار برده می‌شوند [۳].

بطور کلی تحقیقات انجام شده در کاربردهای ذکر شده در دو دسته کلی شامل مواد میزبان همسانگرد<sup>۵</sup> و مواد میزبان ناهمسانگرد<sup>۶</sup> انجام پذیرفته‌اند. در دسته مواد همسانگرد مانند حلال‌های معمولی، ویژگی‌های محیط میزبان به جهت وابسته نیستند در حالیکه در ترکیبات ناهمسانگرد ویژگی‌های محیط میزبان، مانند ضریب دی‌الکتریک، ضریب شکست، ویسکوزیته و ... به راستایی که این ویژگی‌ها در آن مورد ارزیابی قرار می‌گیرند وابسته‌اند. مهمترین دسته مواد ناهمسانگرد، که بطور خاص برای کاربردهای اپتیکی و اپتو-الکترونیکی بکار برده می‌شوند، بلورهای مایع<sup>۷</sup> هستند. در واقع بلورهای مایع دسته‌ای از مواد را تشکیل می‌دهند که بواسطه ساختار مولکولی و برهم کنش‌های بلند بُرد مولکولی، تمامی اجزا مولکولی در یک محدوده<sup>۸</sup> از توده<sup>۹</sup> ماده بصورت نظم یافته<sup>۱۰</sup> آرایش می‌یابند. با یک نگرش کلی‌تر، همه انواع حلال‌ها (به عنوان محیط همسانگرد)، ساختارهای بلوری دارای منافذ (مانند ژئولیت‌ها)، ساختارهای پلیمری نفوذ پذیر (مانند پلی متیل آکریل آمیدها)، محلول‌های مواد فعال سطحی و همه انواع بلورهای مایع (به عنوان محیط ناهمسانگرد)، را می‌توان به عنوان میزبان در بررسی‌ها بکار برد.

در مجموعه مطالعاتی که در زمینه بررسی ماهیت و میزان برهم کنش‌های میهمان-میزبان با استفاده از روش‌های طیف‌سنجی (شامل طیف‌سنجی الکترونی، طیف‌سنجی مادون قرمز، طیف‌سنجی رزونانس مغناطیسی هسته و غیره) صورت گرفته است، طیف‌سنجی الکترونی شامل روش‌های جذبی و نشری بواسطه سهولت در کاربرد و دسترسی و نیز تکرارپذیری در ناحیه طیفی مورد نیاز برای مطالعه رنگینه‌ها کاربرد بیشتری یافته‌اند. بطور کلی داده‌های بدست آمده از طیف‌سنجی جذبی و نشری را می‌توان جهت تعیین ماهیت و میزان برهم کنش‌های بین رنگینه و محیط میزبان و اثر این برهم کنش‌ها بر ویژگی‌های ساختاری رنگینه‌ها در حالت پایه<sup>۱۱</sup> و

- 
1. Substrate
  2. Probe
  3. Dye laser
  4. Photosensitive agent
  5. Isotropic
  6. Anisotropic
  7. Liquid crystals
  8. Domain
  9. Bulk
  10. Ordered
  11. Ground state

نخستین حالت برانگیخته<sup>۱</sup> بکار برد. همچنین می توان از این داده ها در کنار مفهوم رابطه خطی انرژی حلالیت<sup>۲</sup> و مقیاس های قطبیت حلال<sup>۳</sup> برای تعیین سهم انواع مختلف برهم کنش های میهمان-میزبان بر تغییرات خواص فوتوفیزیکی رنگینه استفاده نمود. علاوه بر مبنای پویا<sup>۴</sup> بودن برهم کنش های میهمان-میزبان، میزبان-میزبان و میهمان-میهمان می توان از مجموعه نتایج بدست آمده جهت پیش-بینی و تشریح ماهیت و میزان برهم کنش های میزبان-میزبان (حلال-حلال) و میهمان-میهمان (رنگینه-رنگینه) استفاده نمود.

پالسن و همکاران با استفاده از طیف سنجی ماوراءبنفش-مرئی و لومینسانس، این برهم کنش ها را در محیط های حلالی و محیط بلور-مایع برای خانواده رنگینه های مروسیانین مورد مقایسه قرار داده اند [۴]. مسعود<sup>۵</sup> و همکاران به بررسی این برهم کنش ها در برخی ترکیبات آزو پرداخته اند [۵]؛ دی<sup>۶</sup> و همکاران نیز، اثر محیط بر روی برخی ترکیبات زانتن را مورد بررسی قرار داده اند [۶]. همچنین قنادزاده<sup>۷</sup> و همکاران با استفاده از طیف سنجی ماوراءبنفش-مرئی و طیف سنجی انعکاسی، برهم کنش های میزبان-میهمان را در محیط های مختلف (شامل همه انواع ذکر شده در بالا) و با کاربرد خانواده های مختلف از رنگینه های یونی و غیر یونی مورد بررسی قرار داده اند [۷-۹]. بطور کلی مجموعه تحقیقات ذکر شده بیشتر به بررسی جنبه های کیفی برهم کنش ها پرداخته اند. بمنظور انجام بررسی های کمی می توان از ارتباط میان ویژگی های طیفی و خواص مولکولی و ترمودینامیکی مرتبط با این ویژگی ها استفاده نمود.

از جمله این خواص مولکولی، تغییرات ممان دوقطبی<sup>۸</sup> مولکول های رنگینه ضمن انتقال از حالت پایه<sup>۹</sup> به نخستین حالت برانگیخته یکتایی<sup>۱۰</sup> می باشد. این مطالعات بطور گسترده برای بررسی ویژگی های ساختاری رنگینه ها و نیز بررسی اثرات محیط حلالی مورد استفاده قرار گرفته است. بطور مثال راستوگی<sup>۱۱</sup> و همکاران [۱۰] ممان دوقطبی حالت برانگیخته تعدادی از رنگینه های هیدروکسی-کومارین<sup>۱۲</sup> را با استفاده از روش های طیف سنجی و محاسباتی مورد ارزیابی قرار داده اند. کاوسکی<sup>۱۳</sup> و همکاران نیز [۱۱، ۱۲]

- 
1. Excited state
  2. Linear solvation energy relationship
  3. Solvent polarity scale
  4. Dynamic
  5. Masoud
  6. De
  7. Ghanadzadeh
  8. Dipole moment
  9. Ground state
  10. First singlet excited state
  11. Rastogi
  12. Hydroxy coumarin
  13. Kawski



تغییرات ممان دوقطبی رنگینه‌هایی با ویژگی فلورسانس دوگانه<sup>۱</sup> را مورد مطالعه قرار داده‌اند. اینامدار<sup>۲</sup> و همکاران [۱۳] نیز به شیوه-ای مشابه به بررسی تغییرات ممان دوقطبی در تعدادی از رنگینه‌های لیزری<sup>۳</sup> خانواده کومارین<sup>۴</sup> پرداخته‌اند. همچنین هاناگودیمت<sup>۵</sup> و همکاران [۱۴] بر مبنای جابجایی‌های طیفی در حلال‌های مختلف و در ارتباط با پارامتر قطبیت حلال<sup>۶</sup>،  $E_T^N$ ، به بررسی تغییرات ممان دوقطبی در تعدادی از مولکول‌های کومارین فعال زیستی پرداخته‌اند. در چنین بررسی‌هایی تغییرات ممان دوقطبی بین حالت پایه و برانگیخته به تفاوت ویژگی‌های ساختاری مولکول مورد بررسی و تفاوت ماهیت و شدت برهم‌کنش‌های میهمان-میزبان در این دو حالت نسبت داده می‌شود.

آنچه در مورد بررسی تغییرات ممان دوقطبی مورد ارزیابی قرار می‌گیرد عموماً به برهم‌کنش‌های دو جزء حلال و حل‌شونده می-پردازد، در عین حال می‌توان با استفاده از داده‌های طیف‌سنجی و بررسی ویژگی‌های تجمعی<sup>۷</sup> حل‌شونده در محیط میزبان، ضمن تعیین ویژگی‌های ترمودینامیکی تعادل مورد نظر، برهم‌کنش‌های حل‌شونده-حل‌شونده<sup>۸</sup> را نیز مورد ارزیابی قرار داد. بر این اساس آنتونوف<sup>۹</sup> و همکاران [۱۵] به بررسی ویژگی‌های تجمعی تعدادی از رنگینه‌های یونی در محیط آبی پرداخته‌اند. پاتیل<sup>۱۰</sup> و همکاران [۱۶] نیز خود-تجمعی رنگینه متیلن بلو<sup>۱۱</sup> را در حضور مواد افزودنی مورد بررسی قرار داده‌اند و اثر عوامل ساختاری و ساختار تجمع حاصل را ارزیابی نموده‌اند. بصورتی مشابه اثر حضور مواد فعال سطحی<sup>۱۲</sup> بر ویژگی‌های تجمعی رنگینه پائیناسیانول<sup>۱۳</sup> توسط استلریچ<sup>۱۴</sup> و همکاران [۱۷] مورد مطالعه قرار گرفته‌است. همچنین نیمیر<sup>۱۵</sup> و همکاران [۱۸] و تاهارا<sup>۱۶</sup> و همکاران [۱۹] با استفاده از روش‌های طیف‌سنجی به بررسی رفتار تجمعی رنگینه‌هایی از خانواده‌های اکسازین<sup>۱۷</sup> و رودامین<sup>۱۸</sup> پرداخته‌اند. در تمامی مطالعات

1. Dual fluorescence
2. Inamdar
3. Laser dyes
4. Coumarin
5. Hanagodimath
6. Solvent polarity scale
7. Aggregative properties
8. Solute-solute
9. Antonov
10. Patil
11. Methylene blue
12. Surface active agent
13. Pinacyanol
14. Estelrich
15. Knemeyer
16. Tahara
17. Oxazine
18. Rhodamine

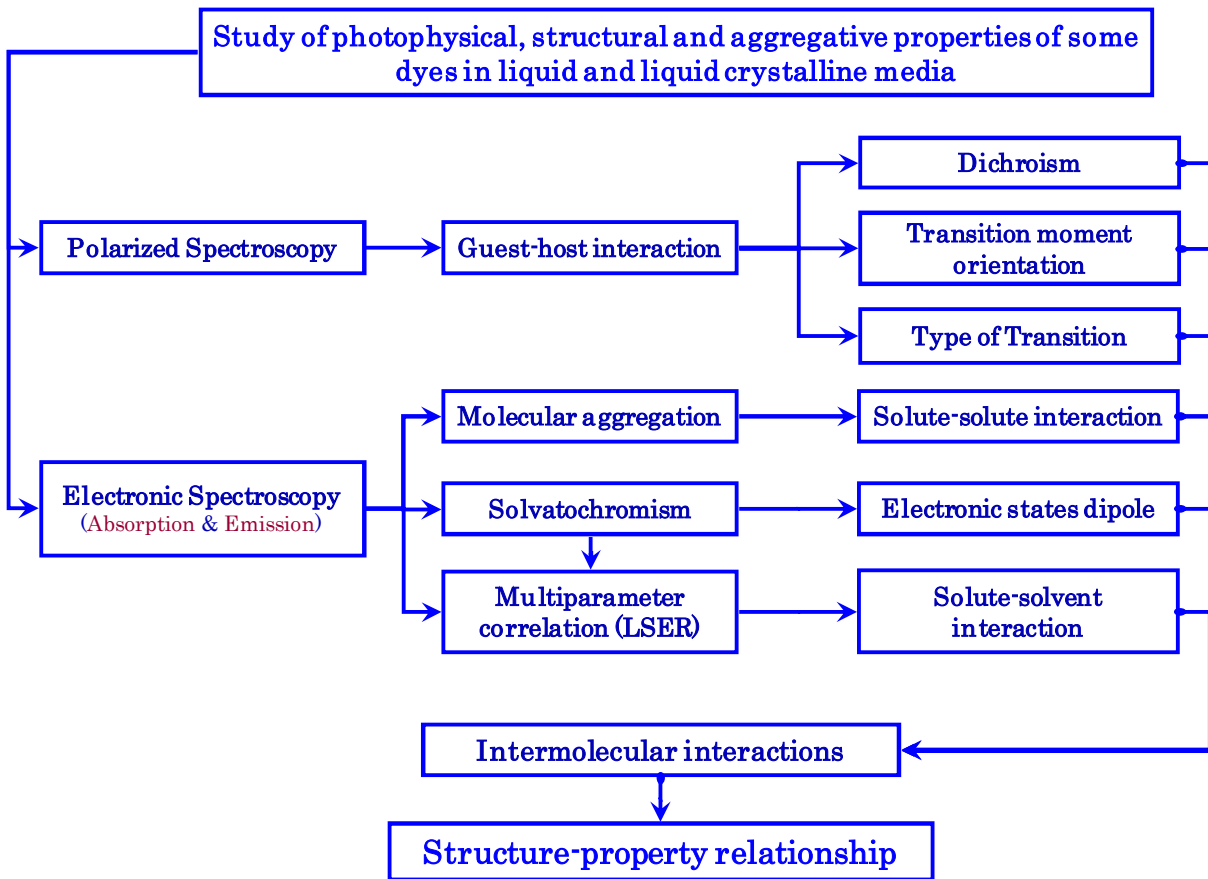
صورت گرفته علاوه بر تعیین ثابت تعادل تشکیل تجمع و محاسبه پارامترهای ترمودینامیکی مربوطه، با استفاده از تئوری‌های مربوط، اطلاعات ارزشمندی در مورد انرژی برهم‌کنش‌ها و نحوه آرایش مولکول‌ها در ساختار تجمعی حاصل می‌گردد.

در کنار مجموعه بررسی‌های فوق می‌توان با استفاده از داده‌های طیفی و بر مبنای مفهوم رابطه خطی انرژی حلالیت، از مقیاس‌های چند پارامتری قطبیت حلال<sup>۱</sup> برای درک بهتر میزان و ماهیت برهم‌کنش‌های تاثیر گذار بر ویژگی‌های طیفی حل‌شونده استفاده نمود. چنین بررسی‌هایی توسط فال<sup>۲</sup> و همکاران [۲۰] برای ساختارهای پلی‌تیوفنی<sup>۳</sup> انجام شده است که در آن نتایج بدست آمده نشان‌دهنده اهمیت برهم‌کنش‌های پیوند هیدروژنی در فرایند انحلال بوده‌اند. سیکوروف<sup>۴</sup> و همکاران [۲۱] نیز از مزایای چنین روشی برای مطالعه اثرات حلال بر ویژگی‌های فوتوفیزیکی رنگینه مروسیانین<sup>۵</sup> استفاده نموده‌اند. مسعود<sup>۶</sup> و همکاران [۵] نیز رفتار سولواتوکرومیک طیف جذبی تعدادی از مشتقات آزو<sup>۷</sup> از خانواده آمینوپیریدین‌ها<sup>۸</sup> را با استفاده از مقیاس‌های چند پارامتری قطبیت حلال مورد ارزیابی قرار داده‌اند. در مجموع چنین ارزیابی‌هایی، زمینه را برای درک بهتر برهم‌کنش‌های موجود و میزان تاثیرگذاری هر یک در ارتباط با ساختار حل‌شونده و حلال فراهم می‌نمایند. در این راستا انجام مطالعات کمی جدید به منظور درک بهتر جزئیات برهم‌کنش‌ها، اثرات عوامل ساختاری میزان و میهمان و نیز نحوه اثر عوامل خارجی بویژه در محیط میزان ناهمسانگرد ضروری به نظر می‌رسد؛ تا بر مبنای اطلاعات بدست آمده در زمینه سنتز ترکیبات جدید و انتخاب عوامل میزان و میهمان و نیز در هنگام کاربرد اثر میهمان-میزبان، قضاوت‌ها و پیش‌بینی‌های دقیق‌تری صورت گیرد [۲۲].

در ادامه تحقیقات پیشین، این رساله به مطالعه خواص فوتوفیزیکی<sup>۹</sup>، ساختاری و تجمعی تعدادی از رنگینه‌ها بر مبنای رفتار سولواتوکرومیک جذبی و نشری در محیط‌های مایع و بلور مایع می‌پردازد. بدین منظور رفتار طیفی مجموعه‌ای از رنگینه‌ها از خانواده‌های اکسازین، کومارین، آزو و آنتراکوئینون<sup>۱۰</sup> در محیط حلال‌های مایع و بلور مایع<sup>۱۱</sup> بررسی می‌گردد و ساختار طیف‌های ثبت شده بطور کیفی مورد مطالعه قرار می‌گیرد. سپس در هر مورد بر مبنای ویژگی‌های رنگینه و متغیر مورد ارزیابی در روند بررسی‌ها، شامل تغییرات محیط حلالی و یا تغییرات غلظت، از روش‌های محاسباتی مناسب جهت بررسی کمی ماهیت و میزان

1. Multiparameter solvent polarity scale
2. Fall
3. Polythiophene
4. Sikurov
5. Merocyanine
6. Masoud
7. Azo
8. Amino pyridine
9. Photophysical properties
10. Anthraquinone
11. Hydrogel

برهم‌کنش‌های بین اجزاء استفاده می‌گردد. در بررسی اثرات محیط‌های حلالی مایع و بلور مایع از مجموعه معادلات توسعه یافته جهت توصیف رفتار سولواتو کرومیک جذبی و نشری برای تعیین تغییرات ممان دوقطبی رنگینه مورد نظر استفاده می‌گردد؛ بعلاوه استفاده از داده‌های تجربی بدست آمده و تحلیل میزان همبستگی<sup>۱</sup> این داده‌ها با معادلات چند پارامتری قطبیت حلال، ابزار مناسبی برای درک بهتر فرایند انتقال الکترونی از حالت پایه به نخستین حالت یکتایی برانگیخته و شناخت بهتر اثر محیط بر پایدارسازی اجزاء حل‌شونده در حالت پایه و برانگیخته، فراهم می‌نماید. بعلاوه قابلیت استفاده از روش‌های بکاربرده شده در تعیین ممان دوقطبی و تحلیل میزان همبستگی با معادلات چند پارامتری قطبیت حلال برای محیط‌های بلور مایع مورد ارزیابی قرار می‌گیرد. با توجه به اینکه در بازه غلظتی مورد استفاده در مطالعات شیمیایی و زیستی عموماً تنها تجمع‌هایی از نوع دimer<sup>۲</sup> قابل ردیابی هستند، در این پروژه ابتدا زمینه‌های تئوری مربوط به تشکیل تجمع دimer بررسی شده و ابزار مناسب جهت تحلیل طیف‌های تجربی بدست-آمده ارائه می‌گردد، سپس از مجموعه نتایجی که توسط این ابزار از داده‌های طیفی استخراج می‌گردد جهت بررسی اثرات جمعی، خواص طیفی و تعیین ماهیت و ساختار جمعی تعدادی از رنگینه‌ها استفاده می‌گردد. در هر بخش، از مجموعه نتایج بدست‌آمده برای هر دسته از رنگینه‌ها، رابطه بین ویژگی‌های ساختاری میزبان و میهمان با ویژگی‌های فوتوفیزیکی رنگینه، مورد ارزیابی قرار می‌گیرد. در نهایت از مجموعه نتایج حاصل جهت ارزیابی میزان کارآیی و دقت روش‌های بکار رفته برای تعیین و تجزیه و تحلیل انواع برهم‌کنش‌ها در محیط‌های حلالی مختلف و به‌ویژه در محیط بلور مایع استفاده می‌گردد. طرح کلی روند بررسی‌های انجام‌شده در شمای ۱-۱ ارائه گردیده است.



شماي ۱-۱ طرح کلی مطالعات انجام شده.