

УДК 541.64:537.3

А.Н.Погребная (5 курс, каф. ПФОТТ), Т.П.Степанова, к.ф.-м.н., ИВС РАН

ДИПОЛЬНЫЙ МОМЕНТ И МЕХАНИЗМ МОЛЕКУЛЯРНОГО ДВИЖЕНИЯ В ЦИАНОБИФЕНИЛ СОДЕРЖАЩЕМ ЖИДКОКРИСТАЛЛИЧЕСКОМ МОНОМЕРЕ В БЛОКЕ В ОТСУТСТВИЕ ВНЕШНИХ ОРИЕНТИРУЮЩИХ ПОЛЕЙ

ABSTRACT: The dipole moment of low-molecular Liquid Crystal in isotropic fusion to absence of external focusing fields research is carried out. It is revealed, that Kirkwood correlation factor g is equal 0,55 that specifies the tendency to antiparallel orientation of molecules CBO-5A in fusion.

Развитие представлений о природе молекулярных взаимодействий, приводящих, в частности, к реализации ЖК состояний связано с молекулярной динамикой веществ. Ценная информация в этом направлении может быть получена при изучении диэлектрической поляризации ЖК соединений.

Целью данной работы является установление диэлектрическим методом корреляций между молекулярными свойствами и тенденцией к реализации ЖК состояний в ЖК мономере 4-[$\omega/2$ -пропеноилокси/-пентилокси]-4'-цианобифенила, ЦБО-5А. В работе приведено исследование диэлектрической поляризации ЦБО-5А в конденсированном состоянии.

Структурная формула ЦБО-5А имеет вид, показанный на рис. 1.

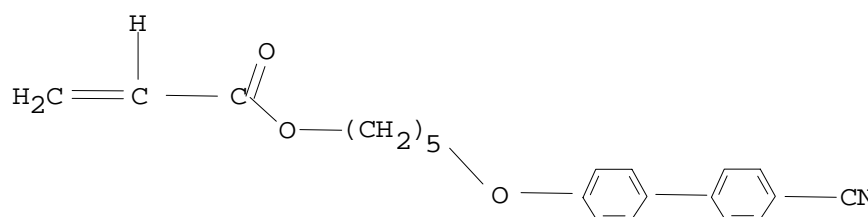


Рис. 1.

Известно [1-3], что цианобифенильный радикал, введенный как фрагмент в структуру молекулы низкомолекулярного соединения или полимера, оказывается ответственным за возникновение мезоморфных свойств.

На рис. 2 представлена температурная зависимость диэлектрической проницаемости ϵ в ЦБО-5А в интервале температур 30-95⁰С. В интервале 63,5-77⁰С диэлектрическая проницаемость СБО-5 возрастает, что может означать, что в указанном интервале температуры имеет место ЖК фаза смектического типа, для которой характерна слоевая структура с антипараллельным упорядочением полярных молекул. С повышением температуры смектический порядок нарушается, и эффект компенсации дипольных моментов между слоями и в слоях ослабевает. В ЖК фазе в интервале 77-89⁰С, как и в изотропной (Т>89⁰С) значения диэлектрической проницаемости СБО-5 велики: $\epsilon \sim 9$, что соответствует большим эффективным молекулярным дипольным моментам. ϵ нормально убывает с повышением температуры (с уменьшением плотности вещества при повышении температуры уменьшается число полярных молекул в единице объема без существенного изменения их ориентационного взаиморасположения).

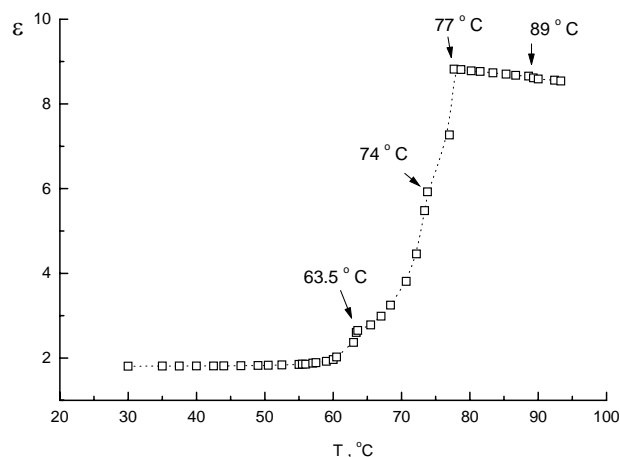


Рис. 2. Температурная зависимость диэлектрической проницаемости ϵ ЖК-мономера ЦБО-5А в блоке в интервале температур: (а) 30–95°С; (б) 89–95 °С (в изотропной фазе).

Эти данные свидетельствуют о том, что в интервале температур 77–89°С в мономере ЦБО-5А имеет место ЖК-фаза нематического типа. Переход из нематической фазы в изотропное состояние в ЦБО-5А происходит ступенчатым образом и с небольшим изменением температурного коэффициента диэлектрической проницаемости.

Из данных, представленных на рис. 2 по формуле Онзагера

$$[(\epsilon - n^2)(2\epsilon + n^2)] / [\epsilon (n^2 + 2)^2] = (4/3) (9\pi N_A / M) \rho (\mu^2 / kT), \quad (1)$$

где ϵ , n , ρ , μ , M – диэлектрическая проницаемость, показатель преломления, плотность, дипольный момент, молекулярная масса, соответственно; T – температура в градусах Кельвина; k – постоянная Больцмана и N_A – число Авогадро был рассчитан дипольный момент ЦБО-5А в изотропном расплаве при $T=90^\circ\text{C}$.

При значениях $\epsilon=8.6$, $n^2=2.14$, $M=335$ и $\rho=1.068$ величина дипольного момента составляет $\mu=3,81\text{D}$. Эта величина дипольного момента меньше значения дипольного момента $\mu_0=5.13\text{D}$, принятого нами за дипольный момент изолированной молекулы ЦБО-5А. Расчет фактора корреляции Кирквуда в ЦБО-5А в блоке дает $g=\mu^2/\mu_0^2=0,55$, что свидетельствует о сильном ориентационном взаимодействии молекул в ЦБО-5А, приводящем к компенсации их диполей. Эти данные свидетельствуют о том, что в изотропном расплаве ЦБО-5А в окрестности температуры фазового перехода из ЖК-состояния в изотропный расплав фиксируются кластеры из ориентационно упорядоченных молекул с антипараллельным расположением цианобифенильных фрагментов.

Таким образом, исследование диэлектрической поляризации в ЖК мономере ЦБО-5А в отсутствие внешних ориентирующих полей установило по данным дипольных моментов наличие кластеров с антипараллельным упорядочением результирующих молекулярных дипольных моментов в блоке

ЛИТЕРАТУРА:

1. Т.И.Борисова, Л.Л.Бурштейн, Т.П.Степанова, С.Г.Костромин, В.П. Шибяев. Высокомолек. соед. 28 Б, 9, 673 (1986).
2. Н.А.Никонорова., Т.И.Борисова. Высокомолек.соед. 35А, 1, 39 (1993).
3. Е.И.Рюмцев, Н.П.Евлампиева, А.П.Ковшик. Журнал Физ.Химии. 69, 5, 934 (1995).
4. Фрелих. Физика диэлектриков. 1966.
5. В.Р.Ратна, R. Shashidhar. Mol.Cryst.Liq.Cryst. 42, 185, (1977).
6. Т.П.Степанова, А.Э.Бурсиан, В.М.Денисов. ФТТ 44, 10, 1900 (2002).

7. Т.П.Степанова, Т.И.Борисова, А.Ю.Осадчев, С.С.Скороходов. Высокомолек.соед. 41А, 10, 1613 (1999).