بیستمین کنفرانس اپتیک و فوتونیک ایران
و ششمین کنفرانس مهندسی و فناوری فوتونیک ایران
۸ تا ۱۰ بهمن ماه۱۳۹۲ - دانشگاه صنعتی شیراز

بررسی اثر محیط های حلالی همسانگرد و ناهمسانگرد بر طیف جذبی رنگینه کومارین ۵۰۴

شهرزاد شهرابی فراهانی ، محمد صادق ذاکرحمیدی

پژوهشکده فیزیک کاربردی و ستاره شناسی، دانشگاه تبریز

چکیده –طیف جذبی رنگینه کومارین ۵۰۴ در حلال های معمولی (همسانگرد) و بلور مایع (ناهمسانگرد) ثبت و بررسی شده است. رفتار فوتوفیزیکی رنگینه حل شده در یک محیط حلالی نمایانگر برهمکنش های رخ داده بین مولکول های رنگینه و حلال بوده و درک صحیحی از خواص حلال ارائه می دهد.

کلید واژه- برهمکنش حلال-حل شونده، بلور مایع، پارامتر های قطبیت حلالی، طیف جذبی

Isotropic and anisotropic environment effect on absorption spectra of Coumarin 504

Shahrzad Shahrabi Farahani, Mohammad Sadegh Zakerhamidi

Research Institute of Applied Physics and Astronomy, University of Tabriz

Abstract- Absorption spectra of Coumarin 504 have been recorded in isotropic and anisotropic solvents. The maximum absorption wavelength of a dissolved dye depends on the solute –solvent interactions and solvent nature and can be used to describe interactions between solvent and solute molecules.

Keywords: absorption spectra, liquid crystal, polarity solvent parameter, solvent-solute interaction

[Downloaded from www.opsi.ir on 2026-11-02]

۱- مقدمه

رنگینه های کومارین به دلیل خواص فیزیکی، شیمیایی و بیولوژیکی دسته مهمی از رنگینه ها هستند. به دلیل همین کاربردهای متنوع بررسی های زیادی روی طیف جذبی این مواد انجام شده است [۱].

تاثیر محیط حلالی بر طیف جذبی ماده حل شده در آن که در نتیجه برهمکنش های فیزیکی حلال – حل شونده رخ می دهد به خوبی شناخته شده است. رفتار فوتوفیزیکی ماده حل شده مثل شدت، شکل و بیشینه طول موج طیف جذبی آن به شدت تحت تاثیر محیط حلالی قرار دارد. این اثرگذاری به نوع و میزان برهمکنش های متقابل حلال – حل شونده بستگی داشته و ناشی از هر دو نوع برهمکنش های غیرویژه (دوقطبی – دوقطبی، دوقطبی – دوقطبی القایی) و ویژه (پیوند هیدروژنی، انتقال بار درون مولکولی) می باشد. برای بررسی کمی این برهمکنش ها استفاده از پارامتر های طیف سنجی قطبیت حلالی کاملت-تافت روشی مرسوم است.[۲-۴]

مقیاس قطبیت حلالی چند پارامتری برای بررسی کمی برهمکنش های حلال-حل شونده مورد استفاده قرار می گیرد. اثر قطبیت حلال بر طیف جذبی با رابطه خطی انرژی انحلال (LSER) بیان می شود. تئوری های زیادی با استفاده از این رابطه ارائه شدند که از بین آن ها تئوری کاملت-تافت که مبتنی بر معادله (۱) است مورد توجه قرار دارد:

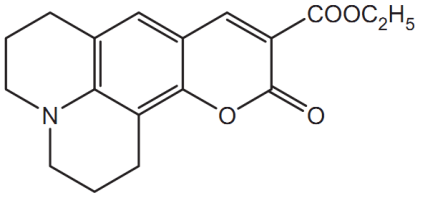
$$\nu = \nu_0 + a\alpha + b\beta + s\pi^* \qquad (۱)$$

α قابلیت دهندگی پیوند هیدروژنی (HBD)، β قابلیت گیرندگی پیوند هیدروژنی(HBA)، π^* قطبش پذیری / دوقطبیدگی حلال و ν_0 مقدار رگرسیون ماده حل شونده در حلال مرجع سیکلوهگزان است. ضرایب ثابت a، b و s نیز فرکانس جذب پارامتر های حلال اند.[۵]

در این پژوهش طیف جذبی رنگینه کومارین ۵۰۴ در محیط های همسانگرد و ناهمسانگرد بررسی شده است.

۲- مواد و وسایل به کار رفته در آزمایش ها

رنگینه کومارین ۵۰۴ به کار رفته در آزمایش از Aldrich (شکل ۱) و حلال های همسانگرد و ناهمسانگرد از Merck خریداری شدند (جدول ۱).



شکل ۱. رنگینه کومارین ۵۰۴

از طیف سنج دوپرتوئی شیمادزو مدل UV-2450 برای ثبت طیف های جذبی استفاده شد.

مشخصات حلال های همسانگرد و ناهمسانگرد استفاده شده در جدول ۱ آورده شده است.

جدول ۱. نام و مشخصات حلال های به کاررفته در آزمایش ها

حلال	ε_r	α	β	π^*	E_T^N
دی اکسان	۲.۲۲	۰.۰۰	۰.۳۷	۰.۴۹	۰.۱۶۳
دکانول	۸.۰۰	۰.۷۰	۰.۸۲	۰.۴۵	۰.۵۲۵
بوتانول	۱۷.۴۰	۰.۸۴	۰.۸۴	۰.۴۷	۰.۵۸۶
استون	۲۱.۰۱	۰.۰۸	۰.۴۸	۰.۶۲	۰.۳۵۵
اتانول	۲۴.۳۰	۰.۸۶	۰.۷۵	۰.۵۴	۰.۶۵۴
DMF	۳۸.۲۵	۰.۰۰	۰.۶۹	۰.۸۸	۰.۳۸۶
DMSO	۴۷.۲۴	۰.۰۰	۰.۷۶	۱.۰۰	۰.۴۴۴
7CP5BOC	۳.۴۰	۰.۰۸	۰.۵۸	۰.۶۲	۰.۳۴۰
7CP7BOC	۳.۵۰	۰.۰۷	۰.۶۰	۰.۶۱	۰.۳۳۰
MBBA	۵.۲۰	۰.۰۹	۰.۶۸	۰.۸۰	۰.۳۹

۳- نتایج به دست آمده از آزمایش ها

داده های حاصل از ثبت طیف ها و نمودار طیف جذبی رنگینه کومارین در حلال های نا همسانگرد و همسانگرد مورد بررسی به ترتیب در جدول ۲ و شکل های ۲ و ۳ آورده شده است.

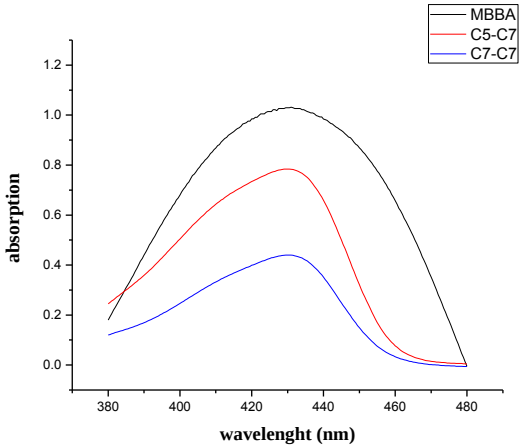
[Downloaded from www.opsi.ir on 2026-11-02]

جدول ۲. بیشینه طول موج جذبی رنگینه در حلال های مورد بررسی

حلال	دی اکسان	دکانول	بوتانول	استون	اتانول	DMF	DMSO	7CP5BOC	7CP7BOC	MBBA
بیشینه طول موج جذبی	۴۲۳.۰	۴۳۴.۰	۴۳۶.۰	۴۲۹.۰	۴۳۶.۰	۴۳۳.۰	۴۳۸.۰	۴۳۰.۱	۴۳۰.۱	۴۳۱.۲

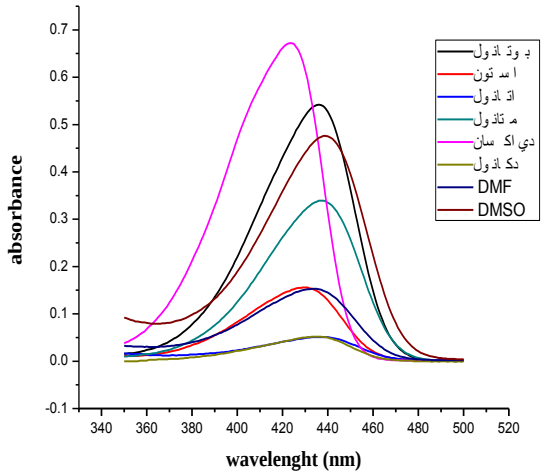
از داده های جدول ۲ می توان دریافت که طیف جذبی رنگینه کومارین ۵۰۴ در حلال همسانگرد DMSO که بالاترین مقدار ε_r را دارد بیشترین طول موج بیشینه جذب را دارد؛ بدین معنی که برهمکنش های بین حلال و رنگینه در محیط هایی با گذردهی نسبی بالا قوی تر است.

برای محیط های ناهمسانگرد بلور مایع (C5-C7) 7CP5BOC، (C7-C7) 7CP7BOC و MBBA که در مقایسه با حلال های معمولی گذردهی نسبی کوچکی دارند؛ بیشینه جذب در طول موج های بلندتری رخ داده است. این بدان معناست که برهمکنش های قوی تری در این حلال ها بین مولکول های رنگینه و بلور مایع وجود دارد. این دسته از برهمکنش ها که برهمکنش های ویژه نام دارند تنها با استفاده از ε_r قابل توجیه نیستند. محیط های بلور مایع به دلیل داشتن سرهای قطبی و گروه های گیرنده (دهنده) پیوند هیدروژنی توانایی ایجاد چنین برهمکنش هایی با مولکول های قطبی دارند. قدرت این برهمکنش ها را با استفاده از پارامترهای قطبیت حلالی کاملت تافت بیان می کنند که برای محیط های حلالی مورد بررسی این پژوهش مقادیر قابل توجهی دارند.



شکل ۲. نمودار طیف جذبی رنگینه کومارین ۵۰۴ در حلال های ناهمسانگرد

در میان حلال های همسانگرد مورد بررسی، رفتار رنگینه در الکل ها نیز جالب توجه است: این دسته از حلال های آلی به دلیل دارا بودن گروه های دهنده هیدروژن برهمکنش های ویژه با مولکول های حل شونده برقرار کرده و در نتیجه بیشینه جذب در طول موج های بلندتر دیده می شود.



شکل ۳. نمودار طیف جذبی رنگینه کومارین ۵۰۴ در حلال های همسانگرد

نتیجه گیری

گذردهی نسبی مقیاسی برای بیان قطبیت حلال است، بنابراین قابل پیش‌بینی‌ست که با افزایش این مقدار محل بیشینه طول‌موج جذبی به سمت طول موج‌های بلندتر برود(شیفت قرمز). اما این روند در مواردی که حلال قادر به انجام برهمکنش‌های ویژه مثل پیوند هیدروژنی باشد(الکل‌ها) صادق نیست؛ با وجود اینکه استون ε_r بزرگتری نسبت به دکانول دارد بیشینه جذب برای این محیط حلالی در طول موج‌های کوتاهتر رخ داده‌است. از اینرو استفاده از رهیافتی چند پارامتری برای بررسی کامل برهمکنش‌های رخ داده الزامی می‌نماید.

[Downloaded from www.opsi.ir on 2026-11-02]

محیط های حلالی ناهمسانگردی چون بلور مایع با وجود پایین بودن ضریب گذردهی نسبی شان، به دلیل دارا بودن گروه‌های مختلف دهنده / گیرنده هیدروژن قادر به ایجاد برهمکنش های قوی با مولکول های حل شونده بوده و می‌توانند در برخی موارد جایگزین حلال های معمولی شوند.

مراجع

[1] S. Kumar, V.C. Rao, R.C. Rastogi, Spectrochim. P. 41-47,Acta 57, 2001.

[2] C. Richardt , Solvent and Solvent Effect in Organic Chemistry, 2nd edn, 1988.

[3] M.S. Zakerhamidi, H. Tajjali, M. Moghaddam, M. Jassas, R. Hosseini nasab, p. 337-341. *Spectro chemical*, Acta part A**77,** 2010.

[4] Carlas. Oliveira, Kerlleyp. Branco, Marricios. Baptista, Guiltorme, p. 2971-2982, S*pectro chemical***,** Acta part A**58,** 2002.

[5] Marti Roses, Urma Buhvestov, Clara Rafols, Fernando Rired, Elisabet Bosch, *J.chem, Soc, perkin Trans*,**2**,1997.

[Downloaded from www.opsi.ir on 2026-11-02]