

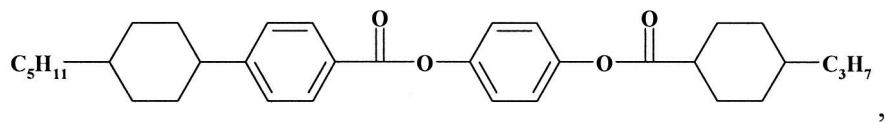
# Investigation of the electron-donor-acceptor properties of liquid crystals by inverse gas chromatography

(title of the dissertation)

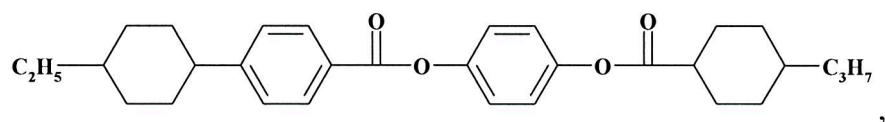
## Summary

I devoted my doctoral dissertation entitled 'Investigation of the electron-donor-acceptor properties of liquid crystals by inverse gas chromatography' to studying the electron-donor-acceptor (EDA) properties of liquid crystals by inverse gas chromatography. It consists of two parts, i.e., theoretical and experimental. First, the theory of liquid crystal stationary phases (LCSPs), their properties and applications were presented. Much of the literature review is devoted to the characterization of liquid crystals used as stationary phases in partition gas chromatography, particularly for separating different analyte groups. This section also focuses on the interactions of non-specific and specific analyte molecules with the liquid crystal molecules that make up LCSPs. Then, the main objectives of the work were presented, the implementation of which was described in the experimental part, after a short presentation of the research techniques used. As the LCSPs, the following liquid crystals were investigated:

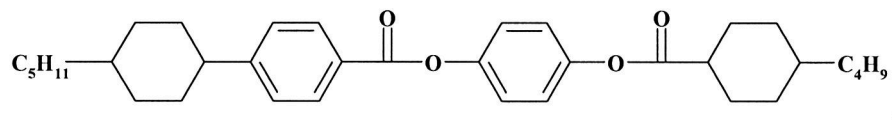
- a. LC1: [4-(4-trans-propylcyclohexane carbonyl)oxyphenyl]4-(4-trans-pentylcyclohexyl)benzoate



- b. LC2: [4-(4-trans-propylcyclohexane carbonyl)oxyphenyl]4-(4-trans-ethylcyclohexyl)benzoate



- c. LC3: [4-(4-trans-butylcyclohexane carbonyl)oxyphenyl]4-(4-trans-pentylcyclohexyl)benzoate



which were made available by professor Roman Dąbrowski.

My doctoral dissertation also presents the research results employing nuclear magnetic resonance (NMR), quantitative structure-activity relationships (QSAR) modelling and inversion gas chromatography. In the chromatographic analysis, the focus was on determining the retention times for the conditions of ideal linear chromatography.

The paper shows that for these chromatographic conditions of the LCSP testing substances, the distortion of the peaks depends only on the strength of non-specific and specific interactions of these substances with the molecules of the tested liquid crystals.

The concept of characterizing the properties of CKFS presented in work:

1. non-specific – based on the  $\gamma_{ads}^{vdW}$  and  $\gamma_{dis}^{vdW}$  values;
2. and electron-donor-acceptor (EDA) – based on the  $\frac{K_A}{K_D}$  values for LCSPs, which, however, do not contradict the basic principles of chemistry and can be successfully used to distinguish the EDA properties of the tested LCSPs clearly.

The last chapters of the experimental section contain a discussion of the EDA properties of the studied liquid crystals in the crystalline phase and, for the first time in the world, in the smectic B and nematic mesophases. A summary and conclusions are attached to the experimental part. The last elements of the dissertation are the list of literature (116 items) used both when writing the theoretical part and discussing the research results and the list of works published during the implementation of the doctoral dissertation.

Marek Puchalski

**Badanie właściwości elektro-donorowo-akceptorowych ciekłych kryształów metodą inwersyjnej chromatografii gazowej**  
(temat dysertacji)

Autor: mgr inż. Marcin Purchała

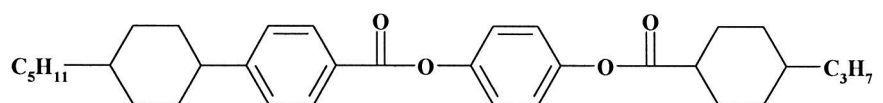
Promotor: dr hab. Henryk Grajek

**Streszczenie**

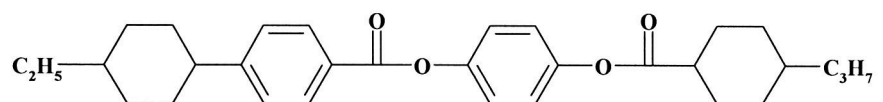
Moją rozprawę doktorską zatytułowaną „Badanie właściwości elektron-donor-akceptor ciekłych kryształów metodą odwróconej chromatografii gazowej” poświęciłem badaniu właściwości elektro-donorowo-akceptorowych (EDA) ciekłych kryształów metodą inwersyjnej chromatografii gazowej. Składa się ona z dwóch części: teoretycznej i doświadczalnej. Na początku przedstawiłem wprowadzenie dotyczące zastosowań ciekłokrystalicznych faz stacjonarnych (CKFS), ich właściwości ze szczególnym uwzględnieniem zastosowań. Znaczną część przeglądu literaturowego poświęciłem charakterystyce ciekłych kryształów stosowanych jako fazy stacjonarne w podziałowej chromatografii gazowej, w tym w szczególności do rozdzielania różnych grup analitów. W tej części skupiłem się także na oddziaływaniach niespecyficznym

i specyficznym molekuł analitów z cząsteczkami ciekłych kryształów tworzących CKFS. Następnie przedstawiłem główne cele pracy, których realizację opisałem w części doświadczalnej, po krótkiej prezentacji stosowanych technik badawczych. Jako CKFS badałem:

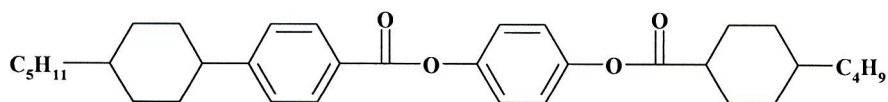
a. CK1: 4-(4-trans-pentylocykloheksylo)benzoesan 4'-(4-trans-propylocyklohekanoiloksy)fenylu



b. CK2: 4-(4-trans-etylocykloheksylo)benzoesan 4'-(4-trans-propylocyklohekanoiloksy)fenylu



c. CK3: 4-(4-trans-pentylocykloheksylo)benzoesan 4'-(4-trans-butylocyklohekanoiloksy)fenylu



które udostępnił profesor Roman Dąbrowski.

W pracy przedstawiłem wyniki badań techniką magnetycznego rezonansu jądrowego (NMR), modelowania techniką quantitative structure-activity relationships (QSAR) oraz inwersyjnej chromatografii gazowej. W badaniach chromatograficznych skoncentrowałem się na wyznaczeniu czasów retencji dla warunków idealnej liniowej chromatografii. W pracy wykazano, że dla tych warunków chromatografowania substancji testujących CKFS zniekształcenie pików zależy tylko od siły oddziaływań niespecyficznych i specyficznych tych substancji z molekułami badanych ciekłych kryształów. Przedstawiona w pracy koncepcja charakteryzowania właściwości CKFS:

1. niespecyficznych – na podstawie wartości  $\gamma_{ads}^{vdW}$  i  $\gamma_{dis}^{vdW}$  ;
2. oraz elektro-donorowo-akceptorowych (EDA) – na podstawie wartości ilorazów  $\frac{K_A}{K_D}$  dla CKFS nie jest jednak w żaden sposób sprzeczna z podstawowymi zasadami chemii, i może być z powodzeniem wykorzystana do jednoznacznego rozróżnienia właściwości EDA badanych CKFS.

Ostatnie rozdziały części doświadczalnej zawierają dyskusję na temat właściwości EDA badanych ciekłych kryształów będących w fazie krystalicznej i po raz pierwszy na świecie w mesofazach: smektycznej B i nematycznej. Do części doświadczalnej dołączono podsumowanie i wnioski. Ostatnimi elementami rozprawy są wykaz literatury (116 pozycji), z której korzystano zarówno podczas pisania części teoretycznej, jak i dyskusji na temat wyników badań oraz lista prac opublikowanych w trakcie realizacji pracy doktorskiej.

Marcin Pucłata