

Title: Induction of smectic A phase in mixtures of liquid crystal compounds with positive and negative dielectric anisotropy

Abstract

This work concerns liquid crystal compounds with positive and negative dielectric anisotropy obtained for the dual frequency addressing technique. In mixtures of these compounds the induction of the SmA phase is observed. In the literature part the classification of liquid crystal phases and the properties of the liquid crystal state as well as the characteristic of quantum mechanical calculations is described. Non-additive behaviors occurring in mixtures of liquid crystal compounds is presented, with the particular emphasis on the induction of liquid crystalline phases. The dual frequency addressing technique is presented and what liquid crystal materials are used in it.

In the research part the results of the miscibility studies for two-component systems of compounds are presented. In these systems, one of the compounds has a positive dielectric anisotropy and the other a negative one. The influence of the structure of both groups of compounds on the temperature and concentration range of the induction of the smectic A phase was determined. The influence of the following parts of the chemical structure of molecules: core structure, type of polar terminal group, lateral substitution of the molecule core with fluorine atoms or cyan groups and the length of terminal chains was established. The structure of the molecular core has the greatest influence on the induction of the smectic A phase, the type of the terminal polar group of the compound with positive dielectric anisotropy has a smaller influence, followed by the presence of lateral substituents, while the length of the terminal chain has the least influence. The structural conditions for the occurrence of the SmA phase induction in the systems of compounds with positive and negative dielectric anisotropy, as well as the conditions when the induction does not occur were described.

The measurements of the thickness of smectic layers were performed to confirm that the monolayer smectic phase A is induced in the investigated systems. Measurements of the enthalpy of phase transitions in systems with induction were made. The calculations of molecular lengths, dipole moments, polarizabilities, electrostatic potential and partial charges were made using quantum chemistry methods. The energy of intermolecular interaction between molecules of compounds with positive and negative dielectric anisotropy was calculated. The influence of the length of the molecules as well as the polarity and polarizability of compounds on the induction of the SmA phase was specified. This work explains the reasons for the induction of smectic phase A in systems with compounds of positive and negative dielectric anisotropy. The work ends with a summary and conclusions, as well as a list of literature (210 publications used) and supplementary materials (a list of phase diagrams and a list of calculated results).

Tytuł: Indukcja fazy smektycznej A w mieszaninach związków ciekłokrystalicznych o dodatniej i ujemnej anizotropii dielektrycznej

Streszczenie

Praca dotyczy związków ciekłokrystalicznych o dodatniej i ujemnej anizotropii dielektrycznej otrzymanych dla techniki adresowania dwiema częstotliwościami. W mieszaninach tych związków została zaobserwowana indukcja fazy SmA. W części literaturowej opisano klasyfikację faz ciekłokrystalicznych i właściwości stanu ciekłokrystalicznego, jak również scharakteryzowano obliczenia metodami chemii kwantowej. Dokonano opisu zjawisk nieaddytywnych występujących w mieszaninach związków ciekłokrystalicznych ze szczególnym uwzględnieniem indukcji faz ciekłokrystalicznych. Przedstawiono na czym polega technika adresowania dwiema częstotliwościami i jakie materiały są w niej wykorzystywane.

W części badawczej na wykresach równowagi fazowej układów dwuskładnikowych przedstawiono wyniki badania mieszalności związków, z których jeden charakteryzuje się dodatnią, a drugi ujemną anizotropią dielektryczną. Określono wpływ struktury obu grup związków na temperaturowo-stężeniowy zakres indukcji fazy smektycznej A. W pracy analizowany był wpływ następujących elementów struktury chemicznej cząsteczek: budowa rdzenia, rodzaj polarnej grupy terminalnej, lateralne podstawienie rdzenia cząsteczki atomami fluoru lub grupami cyjanowymi i długość łańcuchów terminalnych. Największy wpływ na indukcję fazy smektycznej A ma budowa rdzenia związków, mniejszy wpływ ma rodzaj polarnej grupy terminalnej związku o dodatniej anizotropii dielektrycznej, w następnej kolejności obecność podstawników lateralnych, natomiast najmniejszy wpływ ma długość łańcucha terminalnego. W pracy określono warunki strukturalne wystąpienia indukcji fazy SmA w układach związków o dodatniej i ujemnej anizotropii dielektrycznej, a także warunki, kiedy indukcja nie występuje.

Wykonano pomiary grubości warstw smektycznych, które potwierdziły, że w badanych układach indukowana jest monowarstwowa faza smektyczna A. Dokonano pomiarów entalpii przemian fazowych w układach z indukcją. W pracy przedstawiono wyniki obliczeń metodami chemii kwantowej. Wykonano obliczenia długości cząsteczek, ich momentów dipolowych i polaryzowalności, a także ładunków cząstkowych i potencjałów elektrostatycznych. Obliczono energię oddziaływania pomiędzy cząsteczkami związków o dodatniej i ujemnej anizotropii dielektrycznej. Wyjaśniono wpływ długości cząsteczek, a także polarności i polaryzowalności związków na indukcję fazy SmA. W pracy określono przyczyny indukcji fazy smektycznej A w układach związków o dodatniej i ujemnej anizotropii dielektrycznej. Pracę kończy podsumowanie i wnioski, a także wykaz literatury (210 pozycji) oraz 2 załączniki (zestawienie wykresów równowagi fazowej i zestawienie wyników obliczeń).