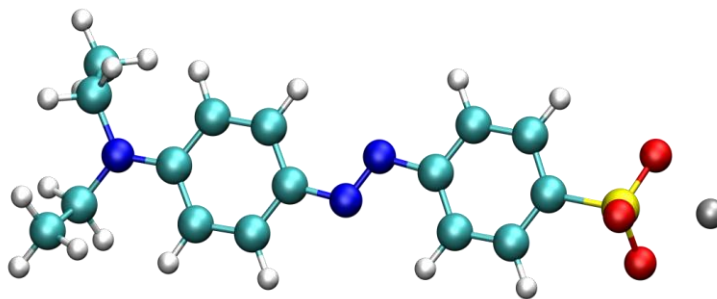


AGGREGATIE VAN AZO KLEURSTOFFEN EN DE INVLOED OP SPECTROSCOPISCHE EIGENSCHAPPEN

Keywords: Spectroscopy, Molecular Dynamics, TD-DFT, Aggregates

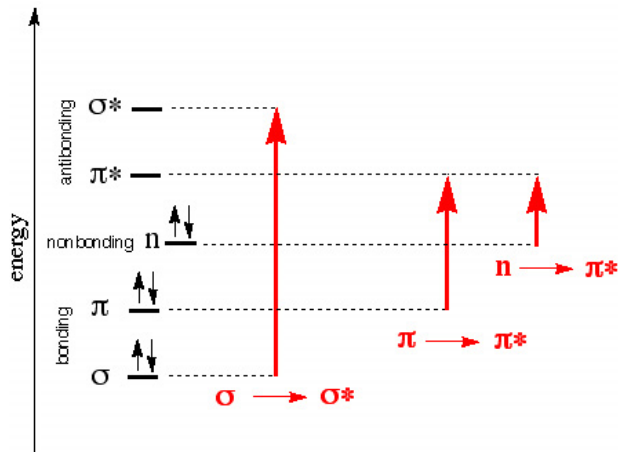
Azo kleurstoffen vormen de grootste en belangrijkste klasse van moderne verfstoffen. Sommige azo componenten, zoals ethyloranje (Figuur 1), vertonen een pH-sensitief gedrag: ze worden gekenmerkt door een kleurverandering bij veranderende pH. Deze kleurveranderingen worden in detail bestudeerd met als doel de pH-sensitieve kleurstoffen toe te passen in nieuwe sensormaterialen, zoals bijvoorbeeld intelligente textielvezels. De studie is meestal gebaseerd op een combinatie van experimentele technieken. **UV-VIS spectra** zijn de belangrijkste spectroscopische techniek voor het bestuderen van kleurstoffen, omdat deze een directe link hebben met de kleur van het species. Deze spectra beschrijven de interacties van materia met licht in het gebied 190-380 nm (UV) en 380-750 nm (VIS). Daarnaast zijn vibrationele spectra (voornamelijk **IR** en **Raman**) ook belangrijk voor de karakterisatie van dergelijke systemen.

Om de verdere ontwikkeling en toepasbaarheid van deze azo kleurstoffen echter te optimaliseren is een grondige theoretische basis nodig, waarbij de invloed van de omgeving (solvent, textielmatrix, ...) goed in kaart gebracht moet worden.



Figuur 1: Geoptimaliseerde structuur van ethyloranje

De interactie van kleurstoffen met een solvent (meestal water) wordt steeds vaker beschreven in de literatuur, maar over de vorming en het belang van aggregaten is nog veel minder gekend. Er zijn nochtans experimentele aanwijzingen dat kleurstof-kleurstof interacties kunnen leiden tot het vormen van stabiele aggregaten. De preciese structuur van deze aggregaten (bv. de grootte) en de invloed hiervan op de spectroscopische eigenschappen (UV-VIS, IR, ...) zijn nagenoeg ongekend.



Naast de studie van de aggregaten op zich, vormt de accurate en betrouwbare berekening van UV-VIS spectra nog steeds een grote uitdaging aangezien dit de kennis van de geëxciteerde toestanden vereist (Figuur 2). Hiervoor kan gebruikt gemaakt worden van CI (configuration interaction)-methoden, of de tijdsafhankelijke variant van dichtheidsfunctionaaltheorie (TD-DFT). Deze methodes zijn computationeel behoorlijk zwaar waardoor efficiënt moet omgesprongen worden met het aantal vrijheidsgraden.

Figuur 2: Energiediagram met aanduiding van toegelaten elektronische transitie die aanleiding geven tot absorptie in het UV-VIS gebied.

Doelstelling

Het doel van deze thesis is het uitvoeren van moleculaire dynamica simulaties (**MD**) in waterige oplossing om geometrieën van mogelijke dimeren en/of trimeren te genereren en optimaliseren. Op basis van deze simulaties kunnen de belangrijke interactiesites geanalyseerd worden, alsook de vorming en het gedrag van de verschillende aggregaten. Hierbij zal **structuurkarakterisatie** een belangrijk onderdeel vormen. De invloed van dimeer- of trimeervorming op de berekende UV-VIS spectra is tevens een van de hoofddoelen van dit thesiswerk, waarbij andere spectra (zoals IR) en interactie-energieën ook bestudeerd kunnen worden.

Dit thesisonderwerp is uitdagend aangezien berekeningen op dergelijke grote systemen heel rekenintensief zijn en er dus slim moet omgegaan worden met de beschikbare computertijd. De thesisstudent kan zelf zijn/haar accenten leggen. De nadruk kan meer gelegd worden op het op punt stellen van de dynamicsimulaties, maar ook op het nagaan van de invloed van de gekozen methode bij het berekenen van de UV-VIS spectra. Er is reeds een intense samenwerking met de Vakgroep Textielkunde van de UGent, die voor de experimentele input zorgen. Het uiteindelijke doel is het vergelijken van experimentele data met berekende resultaten. Indien de student dit wenst, kunnen eventueel zelf experimenten uitgevoerd worden.

Promotoren: Prof. Dr. ir. V. Van Speybroeck - veronique.vanspeybroeck@ugent.be (09/264.65.58),
 Dr. ir. K. Hemelsoet - karen.hemelsoet@ugent.be (09/264.65.64) / **Begeleiding:** ir. T. De Meyer
thierry.demeyer@ugent.be (09/264.65.61) / <http://molmod.ugent.be/student-corner>