

EFFETTO DELL'ACCOPIAMENTO ROTO-TRASLAZIONALE SULLA DIFFUSIONE MACROSCOPICA IN FASI COLESTERICHE

D. Frezzato^(a), G. J. Moro^(a), C. Zannoni^(b)

^(a) Dipartimento di Chimica Fisica, Università degli Studi di Padova, via Loredan 2, 35131, Padova.

^(b) Dipartimento di Chimica Fisica ed Inorganica, Università di Bologna, viale Risorgimento 4, 40136, Bologna.

Lo studio si propone di investigare gli effetti dell'accoppiamento roto-traslazionale (RT) sulla diffusione molecolare macroscopica in fase colesterica, monitorata lungo l'asse elicoidale della fase. L'accoppiamento roto-traslazionale ha una duplice origine: (i) è indotto dalla distorsione periodica del campo del direttore orientazionale lungo l'asse della fase colesterica, comportante un accoppiamento tra il processo traslazionale su scala macroscopica e la dinamica riorientazionale della singola molecola, e (ii) è eventualmente dovuto, compatibilmente con la simmetria molecolare, alla mutua induzione tra dinamica rotazionale e traslazionale nell'intorno viscoso, assunto localmente isotropo e trattabile nell'ambito dell'idrodinamica a basso numero di Reynolds [1]. Il lavoro ha richiesto in primo luogo la connessione formale tra l'osservabile fisica sperimentalmente accessibile, ovvero il coefficiente di diffusione macroscopica lungo l'asse dell'elica, e il processo stocastico di diffusione RT descritto dall'equazione Fokker-Planck-Smoluchowski per le variabili posizionale e orientazionale della molecola [2]. L'utilizzo di modelli idrodinamici standard ha consentito il calcolo della matrice di diffusione RT locale per geometrie molecolari modello. Calcoli preliminari del coefficiente di diffusione al variare del passo dell'elica colesterica sono stati effettuati per geometrie achirali quali ellissoidi [3] e molecole *bent-rod* [4], e per strutture chirali quali i due enantiomeri dello *screw-propeller* [1] (rotore elicoidale costituito da due dischi connessi non coplanari). Per le strutture achirali la riduzione del passo dell'elica comporta la diminuzione del coefficiente di diffusione macroscopica, in come suggerito dall'analisi dei dati sperimentali disponibili [5]. Nel caso delle strutture elicoidali, i due enantiomeri risultano differenziati in base alla loro chiralità di forma confrontata con l'elicità della fase. La teoria può essere quindi impiegata per valutare l'efficacia di un mezzo colesterico quale fase stazionaria in processi di discriminazione enantiomerica.

[1] J. Happel, H. Brenner, "Low Reynolds Number Hydrodynamics", Cap. 5 (Prentice-Hall: Englewood Cliffs, N.J., 1965).

[2] G. Moro, P. L. Nordio, U. Segre, *Chem. Phys. Lett.* **105**, 440 (1984); *ibid.*, *Mol. Cryst. Liq. Cryst.* **114**, 113 (1984).

[3] F. Perrin, *J. Phys. Radium.* **7**, 11 (1936).

[4] W. A. Wegener, *Biopolymers* **20**, 303 (1981).

[5] Z. Yaniv, G. Chidichimo, N. Vaz, J. W. Doane, *Phys. Lett.* **86A**, 297 (1981).