

Полная исследовательская публикация Тематический раздел: Квантово-химические исследования.
Регистрационный код публикации: 13-35-7-10 Подраздел: Супрамолекулярная химия.
Статья публикуется по материалам выступления на XX Всероссийской конференции
“Структура и динамика молекулярных систем”. Яльчик-2013.
Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно
действующей интернет-конференции “Бутлеровские чтения”. <http://butlerov.com/readings/>
УДК 54-126, 544.122.4, 544.18. Поступила в редакцию 12 июля 2013 г.

Супрамолекулярная организация хромофоров в нелинейно-оптических эпоксиаминных олигомерах с дендритными хромофор-содержащими фрагментами

© Шарипова⁺ Анастасия Владимировна, Фоминых Ольга Дмитриевна
и Балакина* Марина Юрьевна

Лаборатория химии углеродных наноматериалов. Институт органической и физической химии
им. А.Е. Арбузова, КазНЦ РАН. Ул. Ак. Арбузова, 8. г. Казань, 420088. Республика Татарстан. Россия.
Тел.: (843) 272-73-43. E-mail: a.v.sharipova@yandex.ru

*Ведущий направление; ⁺Поддерживающий переписку

Ключевые слова: нелинейно-оптическая активность, молекулярное моделирование, квантово-химические расчеты, олигомеры, хромофоры.

Аннотация

Методами молекулярного моделирования исследована структура модельных олигомеров на основе диглицидилового эфира бисфенола-А (ДГЭБА) с ковалентно присоединенными дендритными фрагментами, содержащими азокхромофоры, а также самих дендритных фрагментов. При исследовании димеров обнаружены конформации со стекинг-организацией хромофорных групп. Особенности связывания в подобных стекинг-структурах исследованы в рамках топологического подхода «Атомы в молекулах», установлено существование ван-дер-Ваальсовых взаимодействий между хромофорами. Для стекинг-структуры и отдельного хромофора квантово-химически методом TDHF на уровне HF, а также с использованием DFT (функционалы B3LYP и B97D) рассчитаны электрические характеристики (дипольный момент μ и молекулярные поляризуемости α , β). Установлено, что наличие стекинг-структур способствует увеличению нелинейно-оптической (НЛО) активности молекулярной системы.