

Supramolecular organization of chromophores in nonlinear optical epoxyamine oligomers with dendritic chromophore-containing fragments

© Anastasia V. Sharipova,⁺ Olga D. Fominyh, and Marina Yu. Balakina*

Laboratory of Chemistry of Carbon Nanomaterials, A.E. Arbutov Institute of Organic and Physical Chemistry, Kazan Scientific Center, Russian Academy of Sciences, Ac. Arbuzov St. 8, Kazan, 420088, Tatarstan Republic, Russia, Phone: +7 (843) 272-73-43. E-mail: a.v.sharipova@yandex.ru

*Supervising author; ⁺Corresponding author

Keywords: nonlinear optical activity, molecular modeling, quantum-chemical calculations, oligomers, chromophores

Abstract

Molecular modeling study of the structure of model oligomers based on the diglycidyl ether of bisphenol-A with covalently attached dendritic fragments containing azochromophores and dendritic fragments has been carried out. While studying dimers we found conformations with stacking organization of chromophore groups. Features of binding in similar stacking structures were studied within topological approach "Atoms in Molecules", the existence of van-der-Waals interactions between the chromophores was established. For the stacking structure of the chromophore and the individual quantum-chemical TDHF method at the level of HF, as well as with the use of DFT (functionals B3LYP and B97D) there were calculated electric characteristics (dipole moment μ and molecular polarizabilities α , β). It is established that the presence of stacking structures increases the nonlinear-optical activity of molecular system.

Отформатировано: Цвет шрифта: Авто, английский (США)

Отформатировано: Цвет шрифта: Авто, английский (США)

Отформатировано: Цвет шрифта: Авто, английский (США)

Отформатировано: Цвет шрифта: Авто, английский (США)

Отформатировано: Цвет шрифта: Авто, английский (США)

Отформатировано: Цвет шрифта: Авто, английский (США)

Отформатировано: Цвет шрифта: Авто, английский (США)

Отформатировано: Цвет шрифта: Авто, английский (США)

Отформатировано: Цвет шрифта: Авто, английский (США)

Отформатировано: Цвет шрифта: Авто, английский (США)

Отформатировано: Цвет шрифта: Авто

Отформатировано: Цвет шрифта: Авто, английский (США)

Отформатировано: Цвет шрифта: Авто

Отформатировано: Цвет шрифта: Авто

Отформатировано: Цвет шрифта: Авто, английский (США)

Отформатировано: Цвет шрифта: Авто, английский (США)

Отформатировано: Цвет шрифта: Красный, английский (США)

Отформатировано: Цвет шрифта: Авто

Отформатировано: английский (США)

Отформатировано: английский (США)

Отформатировано: английский (США)

Отформатировано: английский (США)

Отформатировано: английский (США)

Отформатировано: английский (США)

Отформатировано: английский (США)

Отформатировано: английский (США)

Отформатировано: английский (США)

Отформатировано ... [1]

Отформатировано ... [2]

Отформатировано ... [3]

Отформатировано ... [4]

Стр. 10: [1] Отформатировано английский (США)	Александр	26.07.2013 8:09:00
Стр. 10: [2] Отформатировано английский (США)	Александр	26.07.2013 8:09:00
Стр. 10: [3] Отформатировано английский (США)	Александр	26.07.2013 8:09:00
Стр. 10: [4] Отформатировано английский (США)	Александр	26.07.2013 8:09:00