

Тематический раздел: Квантово-химические исследования.

Полная исследовательская публикация

Подраздел: Композиционные материалы.

Регистрационный код публикации: 13-35-7-30

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.

Моделирование нелинейно-оптических материалов на основе композиционных полимеров с бинарными хромофорными группами

© Тухбатулина⁺ Алина Ибрагимовна, 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: april-90@mail.ru

*Ведущий направление; ⁺Поддерживающий переписку

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

Аннотация

С использованием методов молекулярного моделирования исследована структура композиционного материала нового типа, в котором хромофоры-гости содержат трицианоэтенильную электроноакцепторную группу, а полимерная матрица-хозяин моделируется эпоксиаминными олигомерами с мультихромофорными дендритными фрагментами. Электрические характеристики (дипольный момент μ и молекулярные поляризуемости α , β) исследуемых молекулярных систем рассчитаны квантово-химически на уровне TDHF//AM1. Показано, что введение дополнительных хромофоров-гостей приводит к пространственной организации хромофорных групп и увеличению квадратичной нелинейно-оптической (НЛО) активности исследуемых молекулярных систем. Определено оптимальное соотношение между количеством добавочных хромофоров, приходящихся на дендритный фрагмент.