

УДК 544.18; 544.163.2, 544.147.4

ИССЛЕДОВАНИЕ НЕВАЛЕНТНЫХ ВЗАИМОДЕЙСТВИЙ ПРИ ДИЗАЙНЕ ПОЛИМЕРНЫХ МАТЕРИАЛОВ С КВАДРАТИЧНОЙ НЕЛИНЕЙНО-ОПТИЧЕСКОЙ АКТИВНОСТЬЮ¹

Васильев И.В., Шарипова А.В., Фоминых О.Д., Балакина М.Ю.

Институт органической и физической химии им. А.Е. Арбузова ФИЦ КазНЦ РАН
420088, г. Казань, ул. Ак. Арбузова, д. 8
e-mail: vasilyev.ilya.1206@gmail.com

Молекулярными источниками нелинейно-оптического (НЛО) отклика полимерного материала являются органические хромофоры, ориентированные в приложенном электрическом поле. Невалентные взаимодействия между хромофорами (рис. 1а,б), а также между хромофорами и полимерной матрицей (рис. 1в) могут способствовать релаксационной стабильности ориентационного порядка

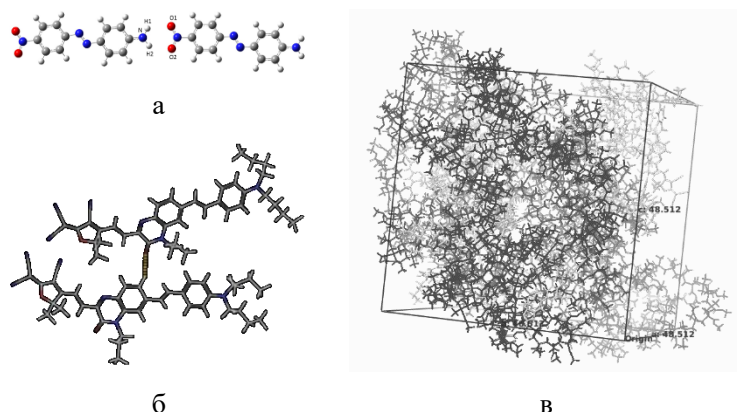


Рис. 1. Исследованные невалентные взаимодействия

хромофоров и связанного с ним НЛО отклика. Влияние невалентных взаимодействий на НЛО характеристики кластеров хромофоров (с азо- и хиноксалиновыми группами в составе π -электронного мостика) и модельных полимерных систем на основе ПММА исследовано методами квантовой химии и атомистического моделирования. Первая гиперполяризуемость хромофоров и димеров, β , рассчитана методами DFT (функционалы M06-2X, ω B97X-D) и MP2. Показано, что образование J-димеров хромофоров приводит к существенному увеличению β в ~ 3 раза. Атомистическое моделирование позволило установить наличие различных невалентных взаимодействий: обычных и ароматических Н-связей и π - π связей как между хромофорами, так и между хромофорами и матрицей.

¹ Работа выполнена при финансовой поддержке Программы Президиума РАН № 32