

МОДЕЛИРОВАНИЕ НЕЛИНЕЙНО-ОПТИЧЕСКОЙ АКТИВНОСТИ ОРГАНИЧЕСКИХ ДЕНДРИТНЫХ МОЛЕКУЛЯРНЫХ СИСТЕМ

О.Д. Фоминых, М.Ю. Балакина

*Институт органической и физической химии им. А.Е. Арбузова КазНЦ РАН,
г. Казань*

При создании новых органических полимерных материалов, обладающих нелинейно-оптической (НЛО) активностью, особое значение приобрело молекулярное моделирование, позволяющее оптимизировать электрические характеристики исследуемых систем. Одним из перспективных направлений создания материалов с квадратичным НЛО откликом является синтез полимеров на основе дендримеров и гиперразветвленных олигомеров с дендритными мультихромофорными фрагментами. Специфическое строение таких систем позволяет минимизировать нежелательное диполь-дипольное взаимодействие хромофоров и оптимизировать НЛО отклик системы. В настоящей работе исследованы модельные дендритные структуры с различными центрами ветвления, разной длиной спейсера и органическими хромофорами в одной, двух или трех ветвях дендрона. В качестве хромофорных фрагментов использовались (4-диметиламино-2-оксиметил)нитробензол и системы на основе 4-амино-4'-нитроазобензола. Методом молекулярной динамики определены предпочтительные конформации исследуемых систем, и квантово-химическими методами рассчитаны их молекулярные поляризуемости (α , β). Изучена зависимость первой гиперполяризуемости, β , дендрона от числа ветвей с хромофорными фрагментами, от их взаимного расположения, исследовано влияние длины спейсера на реализацию конформаций с оптимальным расположением хромофорных фрагментов, а также сшивания ветвей олигомера на значения β . Показано, что эффективность дендритной системы с точки зрения НЛО активности определяется не только числом ветвей, содержащих хромофорные фрагменты, но и структурой дендрона, обеспечивающей минимальные углы между хромофорами разных ветвей.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (проект № 09-03-00696-а).