

# Шарипова Анастасия Владимировна

Отчет за 1 семестр обучения

Направление подготовки	04.06.01 Химические науки
Направленность (специальность)	02.00.04 Физическая химия
Научный руководитель	Балакина Марина Юрьевна
Лаборатория	Функциональных материалов
Тема научно-исследовательской работы	Использование самоорганизации хромофоров, встроенных в дендритные фрагменты в боковых цепях эпоксиаминных олигомеров, при дизайне новых электрооптических материалов

## Образовательный процесс:

1 курс		
Дисциплина «История философии и науки»	Реферат на тему «Динамические полимерные материалы - новый этап в развитии современной химии»	
	Допуск к экзамену	
	Дата сдачи экзамена, оценка	
Дисциплина «Иностранный язык»	Письменный перевод A road map for the calculation of molecular binding energies, T. Dunning, Jr., <i>J. Phys. Chem. A</i> 2000, 104, 9062-9080	
	Допуск к экзамену	
	Дата сдачи экзамена, оценка	

### **Научно-исследовательская работа:**

Было проведено атомистическое моделирование эпоксиаминных олигомеров с мультихромофорными дендритными фрагментами в боковой цепи. В ходе исследований были обнаружены так называемые стекинг-структуры, образованные хромофорами. В дальнейшей работе исследовано влияние стекинг взаимодействий между ароматическими группами на нелинейно-оптические (НЛО) характеристики хромофоров - дипольные моменты, поляризуемости и первые гиперполяризуемости. Для квантово-химических исследований структуры и НЛО характеристик таких молекулярных систем использовались методы, основанные на теории функционала плотности, учитывающие дисперсионные взаимодействия: B97D,  $\omega$ B97X-D, CAM-B3LYP и M06-2X. Для изучения особенностей связывания хромофоров в димере проведен топологический анализ электронной зарядовой плотности в рамках подхода «Атомы в молекулах», в ходе которого установлено, что реализация стекинг-димера происходит за счет ван дер Ваальсовых взаимодействий. Электрические свойства исследованных систем, вычисленные с использованием различных дисперсионных функционалов, позволяют сделать вывод о том, что величина дипольного момента и поляризуемости димера почти в два раза выше, чем у одного хромофора, тогда как первая гиперполяризуемость возрастает незначительно, что объясняется, по-видимому, нарушением  $\pi$ -сопряжения в хромофорах при образовании стопки. В пользу такого заключения свидетельствует вид граничных орбиталей: НОМО охватывает оба хромофора и межмолекулярное пространство, а LUMO сконцентрирована лишь на одном хромофоре, что и влияет на гиперполяризуемость димера. Кроме того, установлено, что заметный рост первой гиперполяризуемости наблюдается при существенном параллельном смещении хромофоров друг относительно друга, что может служить перспективным способом увеличения НЛО активности молекулярной системы.

### **Результативность НИР:**

#### *Список публикаций*

1. **Всероссийская школа-конференция студентов, аспирантов и молодых ученых «Материалы и технологии XXI века»**, Казань, 2014, стендовый доклад, сборник тезисов, с.365.
2. **Итоговая конференция ИОФХ им.А.Е. Арбузова КазНЦ РАН**, 2014, 2015 – стендовые доклады.

### **Направлена в печать статья:**

«The Effect of Dispersion-corrected Density Functional on the Evaluation of Structure and Static First Hyperpolarizability of Stacking-arranged Azochromophores» O.D. Fominykh, A.V. Sharipova, M.Yu. Balakina; направлена в *Journal of Physical Chemistry A*.

**Иные достижения аспиранта:**

Участие в первой международной школе-семинаре «From empirical to predictive chemistry», К(П)ФУ, Казань, 28-29 ноября, 2014.

**Работа над диссертацией:**

Идет работа по подбору материала к литературному обзору.

Аспирант

А.В. Шарипова

Научный руководитель  
д.х.н., зав. лабораторией  
функциональных материалов  
ИОФХ им. А.Е. Арбузова КазНЦ РАН

М.Ю. Балакина