

# Шарипова Анастасия Владимировна

Отчет за 1 год 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»	
	Дата сдачи экзамена, оценка	06.15, отлично
Дисциплина «Иностранный язык»	Письменный перевод (A road map for the calculation of molecular binding energies, T. Dunning, Jr., J. Phys. Chem. A 2000, 104, 9062-9080)	
	Дата сдачи экзамена, оценка	05.15, отлично

## Научно-исследовательская работа:

Ранее 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 гиперполяризуемости. Для квантово-химических исследований структуры и НЛО характеристик таких молекулярных систем использовались методы, основанные на теории функционала плотности, учитывающие дисперсию (DFT-D). Для изучения особенностей связывания хромофоров в димере проведен топологический анализ 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 гиперполяризуемость возрастает незначительно. Незначительный рост первой гиперполяризуемости при образовании димера 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 ЛУМО сконцентрирована лишь на одном хромофоре, что и влияет на гиперполяризуемость димера. Кроме того, установлено, что рост гиперполяризуемости наблюдается и при параллельном смещении хромофоров друг относительно друга, что может служить перспективным способом увеличения НЛО активности молекулярной системы.

## **Результативность НИР:**

### ***Список публикаций***

1. Balakina M., Fominykh O., Levitskaya A., Sharipova A. Self-organization of organic chromophores in design of polymer materials with quadratic nonlinear-optical properties // VII Международный Симпозиум «Дизайн и синтез супрамолекулярных архитектур» 2014, Казань, тез. докл., С.141.
2. Sharipova A.V., Fominykh O.D., Balakina M.Yu. Estimation of the effect of the chromophore stacking on the values of quadratic nonlinear optical characteristics. Quantum-chemical calculations and topological analysis // VII Международный Симпозиум «Дизайн и синтез супрамолекулярных архитектур» 2014, Казань, тез. докл., С.533.
3. Шарипова А.В., Фоминых О.Д., Балакина М.Ю. Дизайн новых электрооптических полимерных материалов с учетом самоорганизации входящих в их состав хромофоров // Всероссийская школа-конференция студентов, аспирантов и молодых ученых «Материалы и технологии XXI века», Казань, 2014, сб. тез., С.365.
4. Шарипова А.В., Фоминых О.Д., Балакина М.Ю. Выбор функционала плотности для оценки первой гиперполяризуемости стекинг-димера, образованного азохромофорами // VII Всероссийская молодежная школа-конференция «Квантово-химические расчеты: строение и реакционная способность органических и неорганических молекул», Иваново, 2015, сб. тез., С.373.
5. O.D. Fominykh, A.V. Sharipova, M.Yu. Balakina The choice of appropriate density functional for the calculation of static first hyperpolarizability of azochromophores and stacking dimers // Int. J. Quant. Chem. DOI: 10.1002/qua.25029.

6. Шарипова А.В., Фоминых О.Д., Балакина М.Ю. Выбор функционала плотности для исследования стекинг-димера, образованного азохромофорами // XXII всероссийская конференция «Структура и динамика молекулярных систем» и XIII школа молодых ученых «Синтез, структура и динамика молекулярных систем», Яльчик, 2015, тез. докл., С.120.

7. Sharipova A.V., Fominykh O.D., Balakina M.Yu. Self-organization of azochromophores in design of polymer nonlinear-optical materials; Molecular modeling and DFT calculations // Вторая международная школа-конференция по органической электронике IFSOE 2015, Москва-2015, тез. докл., С.93.

### *Участие в конференциях*

1. Первая международная школа-семинар «From empirical to predictive chemistry», К(П)ФУ, Казань, 28-29 ноября, 2014

2. Итоговая конференция 2015, ИОФХ им. А.Е. Арбузова КазНЦ РАН (стендовый доклад)

3. VII Международный Симпозиум «Дизайн и синтез супрамолекулярных архитектур», Казань, 2014 (стендовый доклад)

4. Всероссийская школа-конференция студентов, аспирантов и молодых ученых «Материалы и технологии XXI века», Казань, 2014 (стендовый доклад)

5. VII Всероссийская молодежная школа-конференция «Квантово-химические расчеты: строение и реакционная способность органических и неорганических молекул», Иваново, 2015 (устный доклад)

6. XXII всероссийская конференция «Структура и динамика молекулярных систем» и XIII школа молодых ученых «Синтез, структура и динамика молекулярных систем», Яльчик, 2015 (устный доклад)

7. Вторая международная школа-конференция по органической электронике IFSOE 2015, Москва-2015 (стендовый доклад)

### **Иные достижения аспиранта:**

Участие в гранте РФФИ, грант № 15-03-04423-а (Балакина М.Ю.)

Подпись аспиранта

Подпись научного руководителя

**ВЫПИСКА ИЗ ПРОТОКОЛА**  
Заседания научного семинара лаборатории функциональных материалов  
ИОФХ им. А.Е. Арбузова КазНЦ РАН

№ 1

от 13 октября 2015 года

Председатель семинара  
д.х.н., зав. лаб. ФМ

Балакина М.Ю.

Секретарь семинара  
м.н.с., аспирант

Назмиева Г.Н.

**Присутствовали:** сотрудники лаборатории функциональных материалов Института органической и физической химии им. А.Е. Арбузова КазНЦ РАН: член-корр. АН РТ, д.х.н., проф. Нуретдинов И.А., д.х.н., с.н.с. Калинин А.А., к.х.н., с.н.с. Губская В.П., к.х.н., с.н.с. Вахонина Т.А., к.ф-м.н., с.н.с. Фоминых О.Д., к.х.н., н.с. Фазлеева Г.М., к.х.н., н.с. Иванова Н.В., м.н.с. Шарипова С.М., м.н.с. Исламова Л.Н., аспирант Гильмутдинова А.А., аспирант Смирнов М.А, аспирант Левицкая А.И.

**Слушали:** отчет аспиранта по первому году обучения Шариповой Анастасии Владимировны на тему: «Использование самоорганизации хромофоров, встроенных в дендритные фрагменты в боковых цепях эпоксиаминных олигомеров, при дизайне новых электрооптических материалов».

**Постановили:** одобрить отчет по первому году обучения Шариповой Анастасии Владимировны на тему «Использование самоорганизации хромофоров, встроенных в дендритные фрагменты в боковых цепях эпоксиаминных олигомеров, при дизайне новых электрооптических материалов» и рекомендовать к аттестации аспирантов с учетом всех замечаний.

Председатель семинара  
д.х.н., зав. лаб. ФМ

Балакина М.Ю.

Секретарь семинара  
м.н.с., аспирант

Назмиева Г.Н.