

ДИЗАЙН НЕЛИНЕЙНО-ОПТИЧЕСКИХ ХРОМОФОРОВ С ИНДОЛИЗИНОВЫМИ ДОНОРНЫМИ ФРАГМЕНТАМИ¹

Левицкая А.И., Калинин А.А., Фоминых О.Д., Балакина М.Ю.

*ИОФХ им. А.Е. Арбузова КазНЦ РАН, 420088,
г. Казань, ул. Ак. Арбузова, 8, april-90@mail.ru*

Ключевую роль при создании органических нелинейно-оптических (НЛО) полимерных материалов играют органические хромофоры, определяющие их НЛО свойства.

В данной работе впервые предложены НЛО хромофоры с индолизиновыми донорными фрагментами: 1-метил-2-фенилиндолизин-3-ильным и 3-метил-2-фенилиндолизин-1-ильным. В качестве акцепторного фрагмента был использован 5,5-диметил-2-дицианометилен-3-циано-2,5-дигидрофуран-4-ильный. Было изучено влияние региоселективности присоединения индолизинового фрагмента положением 1 и 3 к π -электронному мостику (2,5-дивинилтиофеновому, тетраеновому и 3,7-дивинилхиноксалин-2-оному) на НЛО свойства хромофоров. В случае несимметричного 3,7-дивинилхиноксалин-2-онового мостика рассмотрена также региоселективность присоединения донорной и акцепторной групп.

Геометрическая структура и электрические характеристики (дипольный момент μ , поляризуемость α и первая гиперполяризуемость β) молекул были рассчитаны методом DFT с использованием функционалов плотности B3LYP и M06-2X. Установлено влияние региоселективности обоих типов на величину электрических характеристик. Показано, что наиболее перспективными с точки зрения величины первой гиперполяризуемости являются хромофоры с 1-метил-2-фенилиндолизин-3-ильным донорным фрагментом и двумя π -электронными мостиками: тетраеновым и 3,7-дивинилхиноксалин-2-оным, присоединенным через виниленовую группу по положению 7 хиноксалиновой системы.

¹ Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда, проект №16-13-10215.