

# Elektronowe i optyczne własności azynowych pochodnych tetratriafulwalenów do zastosowań nieliniowoptycznych

L. Mydlova<sup>1</sup>, A. Ayadi<sup>2</sup>, A. El-Ghyoury<sup>2</sup>, B. Sahaoui<sup>2</sup>, M. Makowska-Janusik<sup>1</sup>

<sup>1</sup> *Wydział Matematyczno-Przyrodniczy, Instytut Fizyki, Akademia im. Jana Długosza w Częstochowie, Al. Armii Krajowej 13/15, 42-200 Częstochowa, Polska*

<sup>2</sup> *Laboratoire MOLTECH Anjou, Université d'Angers, IFR Sciences, UMR 6200, CNRS, Bat. K, Bd. Lavoisier, 49045 Angers Cedex, Francja*

Nieliniowoptyczne materiały organiczne ze względu na ich szerokie możliwości zastosowań cieszą się dużym zainteresowaniem naukowców. Łatwa oraz niedroga produkcja jest wielką zaletą tych materiałów. Odgrywają one ważną rolę w fotonowych i optoelektronicznych elementach nowoczesnej informatyki oraz holograficznej technologii obrazowania [1]. Molekuły nieliniowoptyczne zazwyczaj posiadają w swojej budowie grupę elektro-donorową i akceptorową, które są połączone systemem wiązań  $\pi$ -sprężonych. Donorem może być np. grupa tetratriafulwalenowa (TTF) [2].

Prezentowana praca dotyczy analizy własności elektronowych oraz optycznych czterech azynowych pochodnych TTF na drodze badań eksperymentalnych, jak również obliczeń kwantowo-chemicznych. Własności elektronowe liczone metodą teorii funkcjonałów gęstości (DFT) z wykorzystaniem programu GAMESS, natomiast parametry nieliniowoptyczne otrzymano używając programu Gaussian wraz z zależną od czasu metodą DFT. Użyto funkcjonałów B3LYP oraz LC-BLYP, przy czym ten drugi okazał się bardziej korzystny do symulacji liniowych własności optycznych badanych molekuł. Stwierdzono to na podstawie porównania danych teoretycznych z eksperymentalnymi widmami absorpcji UV-vis. Obliczenia prowadzono dla izolowanych cząsteczek w próżni, a także uwzględniono działanie wybranych rozpuszczalników na własności elektronowe ligandów. Symulowane parametry optyczne molekuł, jak również wielkości ich momentów dipolowych pozwalają sądzić, że badane ligandy są obiecującym materiałem nieliniowoptycznym. Użyte rozpuszczalniki nie mają wielkiego wpływu na własności elektronowe badanych chromoforów. Obliczenia energii całkowitej wykazały istnienie dwóch izomerów każdej molekuły.

[1] T. T. Tran, H. Yu, J. M. Rondinelli, K. R. Poeppelmeier, P. S. Halasyamani, *Chem. Mater.* 28, 5238 (2016).

[2] J. Wu, H. Xiao, L. Qiu, Z. Zhen, X. Liu, S. Bo, *RSC Adv.* 4, 49737 (2014).