

ГОСУДАРСТВЕННОЕ НАУЧНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ
«ИНСТИТУТ ФИЗИКО-ОРГАНИЧЕСКОЙ ХИМИИ
НАЦИОНАЛЬНОЙ АКАДЕМИИ НАУК БЕЛАРУСИ»

Объект авторского права
УДК 535.5(043.3)+538.9(043.3)

ШАХАБ
Сиямак Насер

**ПЛЕНОЧНЫЕ ПОЛЯРИЗАТОРЫ РАЗЛИЧНОГО
ФУНКЦИОНАЛЬНОГО НАЗНАЧЕНИЯ,
ОКРАШЕННЫЕ ДИХРОИЧНЫМИ КРАСИТЕЛЯМИ**

Автореферат
диссертации на соискание ученой степени
доктора химических наук

по специальности
02.00.04 – физическая химия

Минск 2023

Научная работа выполнена в Государственном научном учреждении «ИНСТИТУТ ФИЗИКО-ОРГАНИЧЕСКОЙ ХИМИИ НАЦИОНАЛЬНОЙ АКАДЕМИИ НАУК БЕЛАРУСИ» и Государственном научном учреждении «ИНСТИТУТ ХИМИИ НОВЫХ МАТЕРИАЛОВ НАЦИОНАЛЬНОЙ АКАДЕМИИ НАУК БЕЛАРУСИ»

Научный консультант: **Агабеков Владимир Енокович**
академик, доктор химических наук, профессор, заведующий отделом физико-химии тонкопленочных материалов Государственного научного учреждения «ИНСТИТУТ ХИМИИ НОВЫХ МАТЕРИАЛОВ НАЦИОНАЛЬНОЙ АКАДЕМИИ НАУК БЕЛАРУСИ»

Официальные
оппоненты: **Свиридов Дмитрий Вадимович**
член-корреспондент, доктор химических наук, профессор, заведующий кафедрой неорганической химии Белорусского государственного университета

Прокопчук Николай Романович
член-корреспондент, доктор химических наук, профессор, профессор кафедры полимерных композиционных материалов Учреждения образования «Белорусский государственный технологический университет»

Маскевич Александр Александрович
доктор физико-математических наук, доцент, заведующий кафедрой общей физики Учреждения образования «Гродненский государственный университет имени Янки Купалы»

Оппонирующая
организация: Государственное научное учреждение «ИНСТИТУТ ОБЩЕЙ И НЕОРГАНИЧЕСКОЙ ХИМИИ НАЦИОНАЛЬНОЙ АКАДЕМИИ НАУК БЕЛАРУСИ»

Защита диссертации состоится «12» сентября 2023 г. В 14⁰⁰ на заседании Совета по защите диссертации Д 01.24.01 в Государственном научном учреждении «ИНСТИТУТ ФИЗИКО-ОРГАНИЧЕСКОЙ ХИМИИ НАЦИОНАЛЬНОЙ АКАДЕМИИ НАУК БЕЛАРУСИ» по адресу: 220072, г. Минск, ул. Сурганова, 13, ком. 402, тел/факс (+375) 272-16-79, e-mail: sekr@ifoch.bas-net.by

С диссертацией можно ознакомиться в Государственном научном учреждении «ИНСТИТУТ ФИЗИКО-ОРГАНИЧЕСКОЙ ХИМИИ НАЦИОНАЛЬНОЙ АКАДЕМИИ НАУК БЕЛАРУСИ».

Автореферат разослан « » 2023 г.

Ученый секретарь Совета по
защите диссертаций Д 01.24.01,
кандидат химических наук

С.А. Праценко

ВВЕДЕНИЕ

На современном этапе развития науки и техники для отображения информации в приборах, предназначенных для различных технических и научных целей, а также в многочисленных изделиях бытового назначения (телефонах, компьютерах, часах и др.) используются жидкокристаллические индикаторы и дисплеи (ЖКИ, ЖКД), обязательными элементами которых являются поляризующие устройства и, прежде всего, пленочные поляризаторы. Расширение областей применения ЖКИ и ЖКД стимулирует разработку материалов, пригодных для поляризации света в широком спектральном диапазоне, обладающих высокой поляризующей способностью и обеспечивающих улучшенные контрастность, яркость и эксплуатационные свойства индикаторов и дисплеев. Важно также, чтобы поляризаторы, предназначенные для массового использования, могли конкурировать с существующими по цене и доступности технологии их изготовления.

До сегодняшнего дня пленочные поляризаторы на основе поливинилового спирта с дихроичными красителями находят широкое практическое применение в технике и технологии. Их высокая конкурентоспособность на рынке поляризующих материалов обусловлена высокими оптическими характеристиками, доступностью, относительно низкой стоимостью сырья и простотой технологии изготовления. Большая часть пленочных ПВС-поляризаторов с дихроичными агентами разработана для видимой области спектра, получены образцы и для ближнего УФ диапазона. Однако для нового поколения жидкокристаллических устройств отображения информации, электронных приборов и устройств промышленного, специального и бытового назначения требуются поляризаторы, не только улучшающие контрастность, яркость и стабильность работы индикаторов и дисплеев, но и обладающие диапазоном действия, расширенным в ближние УФ и ИК области спектра. Поэтому исследования, направленные на создание поляризующих систем, являются актуальными и своевременными.

Поляризация света дихроичными пленками связана со способностью содержащейся в них хромофорной системы селективно поглощать одну из компонент падающего на пленку излучения, электрический вектор которой совпадает с направлением момента электронного перехода, и пропускать вторую ортогональную компоненту. Такими хромофорными системами являются органические красители, среди которых следует выделить соединения с несколькими азогруппами. Возможность регулирования их оптические свойства комбинированием количества связанных азогруппой бензольных и нафталиновых фрагментов, а также определенным подбором

электроноакцепторных и электронодонорных заместителей, высокая интенсивность длинноволнового поглощения азокрасителей и их хорошая совместимость со многими полукристаллическими полимерами делает эти соединения эффективными дихроичными компонентами поляризационных пленочных материалов.

Поляризующая способность ПВС-пленок с дихроичными красителями проявляется в тех областях спектра, где наблюдается максимальное поглощение света дихроичным агентом, и ограничивается узким поглощением. Поэтому для разработки широкополосных ПВС-поляризаторов целесообразно использовать смеси красителей разных классов. В таких системах необходимо знать не только спектральные характеристики и ориентационные параметры индивидуальных красителей, но и специфику процессов их межмолекулярного взаимодействия их молекул.

В последние 20 лет в тематической группе оптических поляризаторов Института физико-органической химии НАН Беларуси и лаборатории оптических анизотропных пленок Института химии новых материалов проводились исследования по разработке пленочных ПВС-поляризаторов для разных целей. Это было необходимо для создания отечественного материала и разработки технологии его получения. За основу взят процесс формирования поляризатора из ПВС с дихроичным компонентом (молекулярный йод или дихроичный краситель). Данный выбор обоснован высокой оптической прозрачностью ПВС-пленки в видимой области спектра, легкостью получения из нее поляризационной пленки с высокой поляризующей способностью, экологической безопасностью используемых реагентов и их доступностью.

В мировой практике йодный поляризатор или поляризатор Н-типа получил наибольшее распространение, так как для его разработки в качестве дихроичного агента используют молекулярный йод. Йодные поляризаторы обладают высоким поглощением света по всей видимой области спектра. Однако они недостаточно устойчивы к воздействию сравнительно больших температур ($+60,0\text{ }^{\circ}\text{C}$) и повышенной влажности ($50,0\text{ }\%$), что сопровождается снижением их поляризующей способности при эксплуатации ЖКУ и ЖКИ в соответствующих климатических условиях. Необходимость создания тепло- и влагостойких ПВС-поляризаторов стимулировала проведение исследований по замене молекулярного йода на более теплостойкие дихроичные структуры. Нужно выделить тот факт, что не все изготовленные поляризационные ПВС-пленки могли обеспечить высокие спектрально-поляризационные, ориентационные и теплофизические требования, предъявляемые к пленочным поляризаторам из ПВС и дихроичных красителей. В связи с этим, моделирование и синтез

дихроичных структур является актуальной задачей научно-исследовательских организаций и институтов по разработке тепло- и влагостойких пленочных ПВС-поляризаторов различного функционального назначения. Помимо этого, данное направление работы тесно интегрировано с производством микроэлектроники, которое сегодня стратегически важно и значимо для отечественной промышленности.

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Связь работы с крупными научными программами, темами. Диссертационная работа соответствует приоритетному направлению фундаментальных и прикладных научных исследований Республики Беларусь (Постановление Совета Министров Республики Беларусь от 19 апреля 2010 г. № 585) «Супрамолекулярная химия, химический синтез новых веществ и материалов с заданной структурой, функциональными и физико-химическими свойствами. Новые химические продукты и технологии».

Работа выполнена в рамках следующих заданий:

Государственной программы прикладных исследований «Полимерные материалы и технологии» по теме: (2.15.) «Разработка модифицированных поляризационных полимерных пленок с заданными спектральными, тепловыми и электрическими характеристиками» (2006–2010 гг.);

Государственной программы научных исследований «Химические технологии и материалы, природно-ресурсный потенциал», подпрограмма «Полимеры и композиты» по теме: (2.55.) «Разработка оптически анизотропных и фотохромных покрытий и полимерных пленок, допированных наноразмерными частицами красителей, металлов и углеродными нанотрубками» (2011–2015 гг.);

Государственной программы научных исследований «Физическое материаловедение, новые материалы и технологии» (Физматтех) по теме: (6.14.) «Разработка полимерных композиционных систем, наполненных наночастицами и хромофорами различной природы» (2016–2020 гг.);

Проект БРФФИ X06M-160 «Изучение термо- и светостойкости азокрасителей в одноосно ориентированных поливинилспиртовых пленках» (2006–2008 гг.);

Проект БРФФИ №X18-029 «Создание композитных пленок с улучшенными эксплуатационными свойствами на основе поливинилового спирта, содержащего органические красители, полианилин и металлические наночастицы» (2018–2020 гг.).

Грант Президента Республики Беларусь по науке от 19 января 2018 г. № 32 РП.

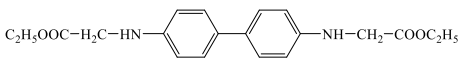
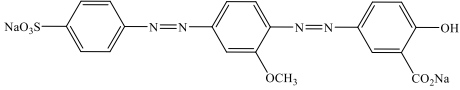
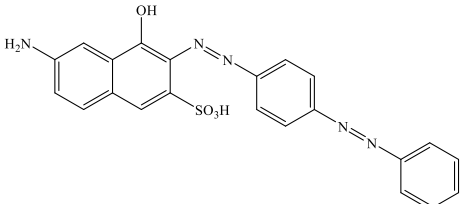
Цель исследования:

Разработка физико-химических основ создания пленочных поляризаторов различного функционального назначения, окрашенных дихроичными красителями для УФ-, видимой- и ближней ИК областей спектра в широком спектральном и температурном интервале.

Задачи исследования:

- осуществить квантово-химическое моделирование дихроичных красителей, поглощающих в УФ-, видимой- и ближней ИК областях спектра с заданными физико-химическими и оптическими свойствами;
- синтезировать соответствующие новые наиболее перспективные соединения ряда азометина, бифенила, оксима и хинолина;
- установить оптимальные условия отдельных стадий (приготовление исходной композиции, окрашивание, химическая обработка, одноосное ориентирование и термофиксация) получения поляризационных поливинилспиртовых пленок;
- разработать технологический процесс получения пленочных ПВС-поляризаторов в широком спектральном диапазоне и температурном интервале со смесями синтезированных красителей и изготовить опытно-промышленные образцы;
- создать устройства с повышенным выходом поляризованного света для видимой области спектра (435, 548 и 611 и 625 нм) и широкого спектрального диапазона (380–650 и 350–850 нм).

Объектом исследования служили пленки из поливинилового спирта, содержащие следующие дихроичные красители:

Краситель	Структурная формула	Название	Выход, мас. %	T _{пл.} , °C
XXI (M ₁₃)		Диэтил 2,2'-([1,1'-бифенил]-4,4'-диил-бисазанедиил)диацетат	77,6	288–290
XXII (M ₁₂)		Натриевая соль 2-гидрокси-5-((2-метокси-4-((4-натрийсульфофенил)дiazенил)фенил)-3-бензойной кислоты	83,2	310–312
XXIII (M _{3H})		6-Амино-4-гидрокси-3-[[4-(фенилазо)фенил]азо]-2-нафталин сульфокислота	81,7	306–308

XXIV (ИК-1, IR-1)		Мононатрий моно(4-(4-(2-(2-хлоро-3-(2-(1-(4-сульфонатобутил)-1,4-дигидрохиолин-4-ил)винил)циклогекс-2-ен-1-илиден)этилиден)-хиолин-1(4Н))-ил)бутан-1-сульфонат	77,6	190–192
XXV (ИК-2, IR-2)		Натрий 4-(4-(2-(2-хлор-1-(2-(4-сульфонатобутил)хиолин-4(1Н)-илиден)этилиден)-1Н-инден-3-ил)винил)-хиолин-1-иум-1-илбутан-1-сульфонат	70,7	155–157
XXVI (ИК-3, IR-3)		Мононатрий моно(4-(2-(2-(2-хлоро-1-(2-(1-(4-сульфонатобутил)-3,4-дигидрохиолин-2(1Н)-илиден)этилиден)-1Н-инден-3-ил)винил)-3,4-дигидрохиолин-1(2Н)-ил)бутан-1-сульфонат	69,8	143–145
(AAFOX-1)		(1Z)-N-бензилиден-4-((E)-1-(оксим)этил)бензенамин	74,3	256–258
(AAFOX-7)		(E)-1-(4-(((Z)-4-гидроксibenзилиден)амино)фенил)этан-1-один оксим	77,5	258–260
(AAFOX-8)		(Z)-1-(4-(((Z)-4-метокси бензилиден)амино)фенил)этан-1-один оксим	83,6	255–257
(РА-100)		(1E,2E)-3-фенил-N-(4-((E)-фенилдиазенил)фенил)проп-2-ен-1-имин	74,2	277–279
(РА-101)		(1E,2E)-3-(4-метокси фенил)-N-(4-((E)-фенил диазенил)фенил)проп-2-ен-1-имин	73,1	275–277

– Поляризирующие устройства для одной длины волны (625 нм), трех длин волн (435, 548 и 611 нм), широкого спектрального диапазона (380–650 нм) и (350–850 нм).

Предмет исследования:

Физико-химические закономерности получения и регулирования структуры и свойств термостойких и влагустойчивых поливинилспиртовых

пленок на основе синтезированных дихроичных красителей и различных неорганических наночастиц.

Научная новизна работы:

- произведено квантово-химическое моделирование новых соединений M_{13} , M_{12} , M_3H , ИК-2, ИК-3, ААFOX-1, ААFOX-7, ААFOX-8, РА-100 и РА-101, являющихся эффективными дихроичными компонентами для получения поляризационных ПВС-пленок, осуществлен их синтез, изучены физико-химические и оптические свойства;

- установлена зависимость спектрально-поляризационных свойств ПВС-пленок от природы и содержания дихроичных органических красителей, их смесей, а также степени одноосного растяжения пленок;

- разработаны поляризационные ПВС-пленки, характеризующиеся высокой степенью поляризации для УФ-, видимой- и ближней ИК областей спектра, соответствующие уровню мировых аналогов;

- впервые теоретически обосновано и экспериментально подтверждено влияние степени упорядоченности молекул красителей в полимерной матрице на спектрально-поляризационные свойства пленок;

- созданы новые высокоэффективные поляризующие материалы на основе поливинилового спирта и дихроичных красителей M_{13} , M_{12} , M_3H , ИК-2, ИК-3, ААFOX-1, ААFOX-7, ААFOX-8, РА-100 и РА-101;

- впервые разработаны принципы технологии создания пленочного поляризатора из ПВС и дихроичных красителей с расширенным диапазоном температур эксплуатации (от $-60,0\text{ }^{\circ}\text{C}$ до $+90,0\text{ }^{\circ}\text{C}$), предназначенного для применения в составе ЖКИ и ЖКУ;

- впервые получены экспериментальные образцы поляризующих устройств с повышенным выходом поляризованного света для одной длины волны (625 нм), трех длин волн (435, 548 и 611 нм) и широкого спектрального диапазона (380–650 и 350–850 нм).

Положения, выносимые на защиту:

- Квантово-химическое моделирование дихроичных красителей (их равновесных геометрических параметров, энергий граничных орбиталей, вертикальных возбуждений и электронных спектров) для создания новых термостойких (от $-60,0\text{ }^{\circ}\text{C}$ до $+90,0\text{ }^{\circ}\text{C}$) поляризационных ПВС-пленок в широком спектральном диапазоне (УФ-, видимой- и ближней ИК областях спектра).

- Результаты получения узкополосных и широкополосных анизотропных ПВС-пленок, окрашенных новыми дихроичными органическими красителями и их смесями, с максимумами поглощения для различных длин волн в интервале 270–870 нм, поляризующей способностью 97–99 % и термостойкостью от $-60,0\text{ }^{\circ}\text{C}$ до $+90,0\text{ }^{\circ}\text{C}$.

– Закономерности влияния состава композиций из синтезированных новых и коммерческих красителей, их смесей и наночастиц оксида цинка, магнетита и золота, и степени одноосной ориентации на оптические, ориентационные и теплофизические свойства (теплопроводность и термостойкость) анизотропных узкополосных и широкополосных окрашенных ПВС-пленок с заданными характеристиками.

– Технологический процесс изготовления поляризатора широкого спектрального диапазона (270–870 нм) для УФ-, видимой- и ближней ИК областей спектра на основе ПВС-пленок, окрашенных органическими красителями и их смесями, с высокими эксплуатационными характеристиками: температурой эксплуатации от $-60,0\text{ }^{\circ}\text{C}$ до $+90,0\text{ }^{\circ}\text{C}$, влагостойкостью 90,0 %.

– Создание оригинальных суперполяризующих устройств на основе многослойных покрытий из оксидов титана, кремния, циркония, ниобия и сульфида цинка с выходом поляризующего света более 55,0 % и степенью поляризации 99,9 %.

Личный вклад соискателя. Автором самостоятельно систематизированы и проанализированы литературные данные по теме диссертации, выполнено планирование эксперимента и решены поставленные задачи. Постановка цели и задач исследования, обсуждение полученных результатов и выводов проводились совместно с академиком, д.х.н., профессором В.Е. Агабековым. Получение и исследования физико-химических свойств наночастиц металлов выполнено совместно с сотрудниками Института химии новых материалов НАН Беларуси д.х.н. Ереминым А.Н., к.х.н. Игнатович Ж.В. и к.х.н. Ивановой Н.А. Дихроичные красители получены совместно с сотрудниками Института физико-органической химии НАН Беларуси к.х.н., Дикусаром Е.А. и Института прикладных физических проблем БГУ имени А.Н. Севченко к.х.н., Луговским А.П. Изучение спектрально-поляризационных и теплофизических свойств ПВС-пленок проведено совместно с сотрудниками ИФОХ НАН Беларуси к.х.н. Арико Н.Г., к.х.н. Филиппович Л.Н. и к.х.н. Алмодарресие Х.А. Разработка и изучение оптических свойств поляризующих делителей проведено совместно с сотрудниками ИФ НАН Беларуси академиком, д.ф.-м.н., профессором Белым В.Н. и д.ф.-м.н., профессором Курилкиной С.Н. Экспериментальные образцы поляризационных ПВС-пленок получены самостоятельно. Полное квантово-химическое моделирование дихроичных красителей, их комплексов с наночастицами в вакууме и среде растворителей, расчет полной энергии, равновесных геометрических параметров, УФ-, ИК- и ЯМР спектров проведены лично автором.

Апробация диссертации и информация об использовании ее результатов. Результаты работ докладывались на: 15th International workshop on inorganic and organic electroluminescence (Санкт-Петербург, Россия, 2010 г.); 2-ой Международной конференции по химии и химической технологии (Ереван, Армения, 2010 г.); 2-ой научной конференции Армянского химического общества «Новые материалы и процессы» (Ереван, Армения, 2010 г.); XIX Международном симпозиуме «Перспективные технологии дисплеев и полупроводниковой осветительной техники». ADLT-2011 (Логойск, Республика Беларусь, 2011 г.); XXVI Международной научно-технической конференции «Химические реактивы, реагенты и процессы малотоннажной химии». Реактив-2012 (Минск, Республика Беларусь, 2012 г.); 3th scientific conference of Iranian students in Belarus. Book of abstracts (Minsk, Belarus, 2012); XXVII Международной научно-технической конференции «Химические реактивы, реагенты и процессы малотоннажной химии» Реактив-2013 (Иркутск, Россия, 2013 г.); International conference SATF 2014 (Cesme, Izmir, Turkey, 2014); Международном форуме «Modeling of synthesis and destruction of advanced materials» (Минск, Республика Беларусь, 2018 г.); Международной конференции «Наноструктуры в конденсированных средах (ФНСКС-2018). Институт тепло- и массообмена имени А. В. Лыкова НАН Беларуси (Минск, Республика Беларусь, 2018 г.); II международной научной конференции «Техногенные системы и экологический риск» (Обнинск. Россия, 2018 г.); Proceedings of the VIII International Scientific Conference of young scientists, graduates, masters and PhD students (Minsk, Republic of Belarus, 2018); 14-ой международной конференции «Пленки и покрытия-2019» (Санкт-Петербург, Россия, 2019); XXI Менделеевском съезде по общей и прикладной химии (Санкт-Петербург, Россия 2019 г.); 47th SID International Symposium «Liquid Crystals Today» (Сан-Антонио, Техас, США, 2019); VI Республиканской научно-технической конференции молодых ученых, посвященная памяти члена-корреспондента НАН Беларуси С.С. Песецкого (Гомель, Республика Беларусь 2020 г.); Всероссийской научной конференции МФТИ. Нано-, био-, информационные, когнитивные и социогуманитарные науки и технологии. Долгопрудный – Жуковский МФТИ 2020 (Москва, Россия, 2020 г.); Сахаровских чтениях 2020 года: экологические проблемы XXI века: материалы 20-й международной научной конференции (Минск, Республика Беларусь, 2020 г.); International Conference on Nanotechnology and Nanoscience (Tehran. Iran 2020); 15-й Международной конференции «Пленки и покрытия – 2021» Санкт – Петербург, Россия, 2021 г).

Результаты диссертационной работы явились основой для заключения (или были использованы при выполнении) 8 научно-исследовательских контрактов (в том числе с зарубежными заказчиками из России и Израиля).

Опубликованность результатов. По материалам диссертации опубликована 91 научная работа, в том числе 53 статьи в научных рецензируемых журналах на английском и русском языках (67,1 авторского листа), 14 статей в сборниках материалов международных конференций и симпозиумов (13,9 авторского листа), 21 тезисы докладов (0,3 авторского листа) и 3 патента Республики Беларусь (3,5 авторского листа). Общий объем публикаций – 84,8 авторского листа.

Структура и объем диссертации. Диссертация состоит из введения, общей характеристики работы, шести глав, заключения, библиографического списка и двух приложений.

Общий объем диссертации – 260 страниц, в том числе 154 рисунка на 119 страницах, 66 таблиц на 67 страницах. Библиография включает список использованных источников из 295 наименований на 26 страницах и 91 публикации соискателя на 12 страницах.

ОСНОВНОЕ СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Первая глава посвящена описанию современных представлений о проблематике создания поляризационных пленок из ПВС и йода или дихроичных красителей для разных областей спектра. Рассмотрены теоретические, основополагающие принципы, используемые при получении пленочных поляризаторов света. Подробно описаны типы поляризаторов и способы их создания [1-10, 14,15]. Структура поляризатора представлена на рисунке 1.



Рисунок 1 – Принципиальная схема поляризатора

Спектрально-поляризационные свойства и термостойкость окрашенных ПВС-пленок зависят не только от природы красителя, но и от его количества в полимерной матрице и степени растяжения пленки. Однако эти зависимости изучены в недостаточной степени и часто имеют сложный характер, поскольку каждая индивидуальная система, особенно содержащая

смесь красителей, имеет свои особенности, определяющиеся состоянием полимерной матрицы и красителя в пленке, а также взаимодействием между макромолекулами полимера и молекулами введенного вещества.

Описываются полуэмпирические методы, методы Хартри-Фока и теории функционала плотности (HF и DFT) и различные базисные наборы для моделирования структур, содержащих до 100 атомов [11-13, 16-29].

Большинство линейных пленочных поляризаторов, использующихся в настоящее время, являются дихроичными поляризаторами, которые генерируют поляризованный свет за счет поглощения одной из компонент падающего излучения. Работы по созданию поляризаторов с повышенным выходом поляризованного излучения направлены на получение многослойных отражающих структур из доступных и дешевых материалов с использованием легко реализуемых технологий. В основе работы поляризационных устройств, служащих для получения поляризованного света, лежит явление двойного лучепреломления.

Во второй главе приведены и обсуждены методы синтеза и физико-химические свойства производных азометинов, азокрасителей, оксимов и бензойной кислоты для включения в поляризационные ПВС-пленки.

Описаны спектрально-поляризационные параметры ПВС-пленок, их основные оптические свойства: пропускание одинарной пленки в поляризованном (k_0) и неполяризованном свете (T_0), степень поляризации (СП), дихроичное отношение (R_d), оптическая анизотропия и ориентационный параметр (S), характеризующий степень упорядоченности молекул красителя в полимерной матрице, методы изучения термостабильности, теплопроводности и светостойкости поляризаторов на основе поливинилового спирта, дихроичных агентов и наночастиц. Приводится синтез наночастиц Fe_3O_4 , CeO_2 , композита Fe_3O_4/CeO_2 и их спектры пропускания и поглощения, а также композитов и смесей с дихроичными агентами [5–А, 10–А, 14–А, 17–А, 18–А].

Синтезирован ряд новых дихроичных агентов производных азометинов, азокрасителей, оксимов и бензойной кислоты. Созданы композиции из НЧ магнетита и IR-3, IR-2, CSB и M_3N с целью расширения спектрального диапазона работы поляризаторов.

В третьей главе приведены результаты квантово-химического моделирования дихроичных красителей для разных областей спектра с целью их целенаправленного синтеза. Методами Хартри-Фока и теории функционала плотности (HF и DFT) рассчитаны равновесные геометрические параметры, энергии граничных орбиталей, ширина запрещенной зоны и электронные спектры синтезированных дихроичных агентов [6–А-8–А, 10–А-13–А, 16–А-42–А, 44–А-46–А, 48–А].

Теоретический спектр поглощения оптимизированной молекулы МЗН в среде растворителя (ДМФА) рассчитан с помощью программного пакета Gaussian 09W, используя уровень теории TDB3LYP/6-311++G* (таблица 1). Экспериментальный и рассчитанный электронные спектры поглощения молекулы МЗН в ДМФА практически идентичны в исследуемом спектральном диапазоне (рисунок 2). Первая широкая и интенсивная полоса поглощения с максимумом при 564 нм относится к переходу в первое возбужденное синглетное состояние молекулы ($S_0 \rightarrow S_1$). Расчеты показали, что данное возбужденное состояние описывается волновой функцией, отвечающей наложению пяти конфигураций для одноэлектронных возбуждений (112 $\rightarrow$ 117, 113 $\rightarrow$ 117, 113 $\rightarrow$ 118, 114 $\rightarrow$ 117 и 116 $\rightarrow$ 117). Возбуждение электрона с 113 МО на 117 МО дает основной вклад в полосу поглощения при 564 нм.

Таблица 1 – Рассчитанный электронный спектр поглощения молекулы МЗН

Длина волны, нм	Энергия перехода, эВ	Разложение волновых функций по однократно возбужденной конфигурации	Сила осциллятора (f)
564	2,20	0,11(112 $\rightarrow$ 117) + 0,59(113 $\rightarrow$ 117) – 0,13(113 $\rightarrow$ 118) – 0,29(114 $\rightarrow$ 117) – 0,10(116 $\rightarrow$ 117)	0,51
426	2,91	0,33(113 $\rightarrow$ 117) + 0,60(114 $\rightarrow$ 117) + 0,16(116 $\rightarrow$ 117)	0,67

Примечание – В таблице указаны только переходы, имеющие $f > 0,10$.

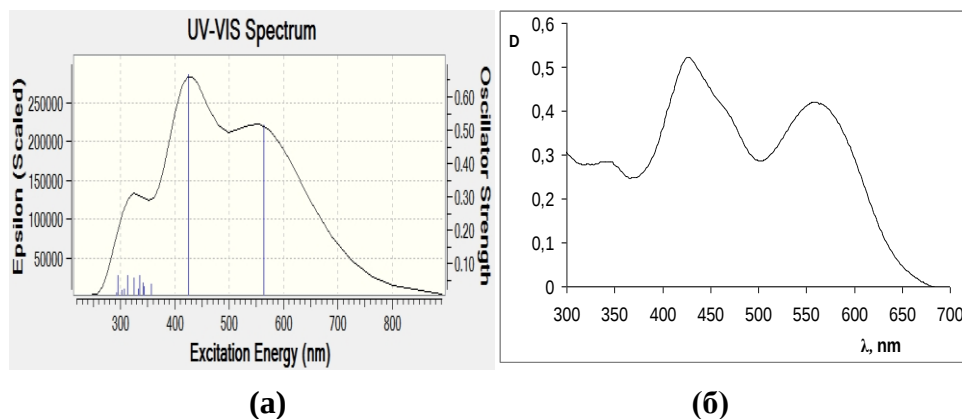


Рисунок 2 – Теоретический (а) и экспериментальный (б) спектры поглощения красителя МЗН (концентрация красителя в ДМФА $5,2 \cdot 10^{-5}$ М/л)

Теоретические спектры поглощения оптимизированных молекул ИК-2 и ИК-3 рассчитаны методом TDB3LYP/6-311G**. Для учета ДМФА применена сольватонная модель, в которой не учитывается микроскопическая структура растворителя с целью экономии машинного времени при расчетах. Экспериментальный и рассчитанный спектры поглощения молекул ИК-2 и ИК-3 в растворителе ДМФА представлены на рисунках 3, 4.

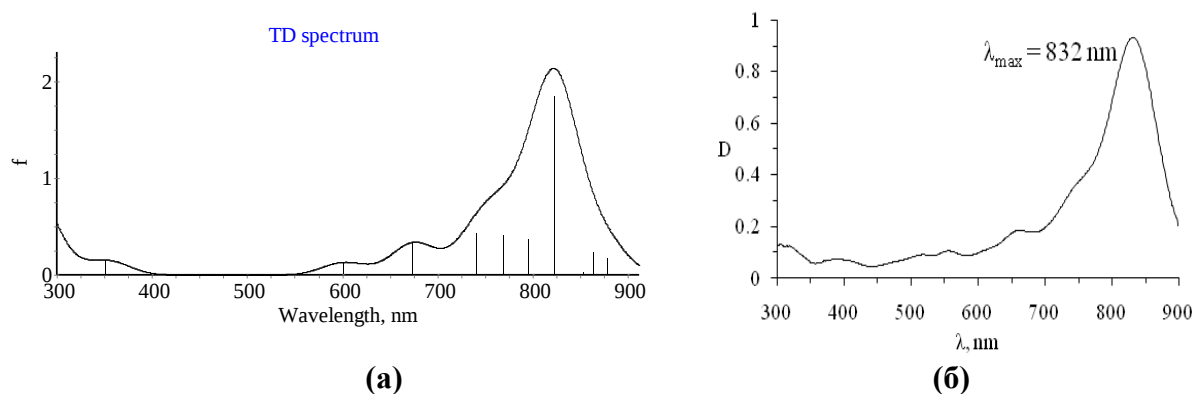


Рисунок 3 – Теоретический (а) и экспериментальный (б) спектры поглощения красителя ИК-2 (концентрация красителя в растворе ДМФА $3,0 \cdot 10^{-5}$ М/л)

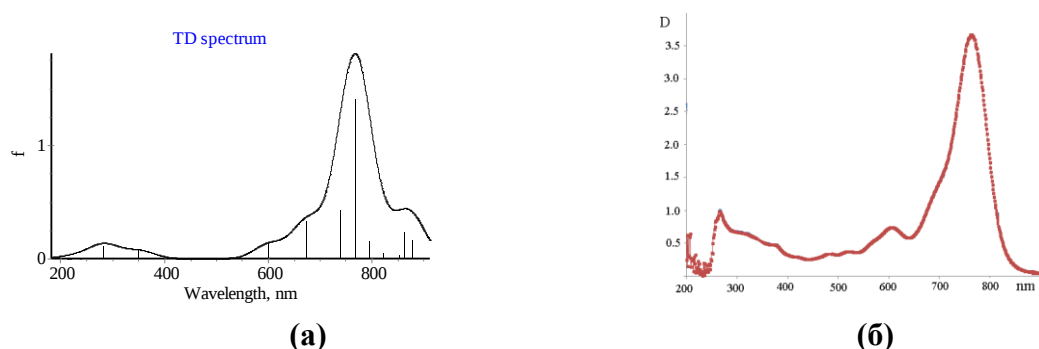


Рисунок 4 – Теоретический (а) и экспериментальный (б) спектры поглощения красителя ИК-3 (концентрация красителя в растворе ДМФА $5,0 \cdot 10^{-5}$ М/л)

Возбуждение электрона с 197 МО на 199 МО дает главный вклад в полосу поглощения при 823 нм (таблица 2). Данная конфигурация соответствует электронному возбуждению в инденовом фрагменте.

Таблица 2 – Рассчитанный электронный спектр поглощения молекулы ИК-2 в области 600–900 нм

Длина волны, нм	Энергия перехода, эВ	Разложение волновых функций по однократно возбужденной конфигурации	Сила осциллятора (f)
879	1,98	0,68(198→199)	0,17
865	3,61	– 0,14(81→84) + 0,68(82→83)	0,23
823	4,49	0,34(197→199) + 0,29(197→204) + 0,33(197→207) – 0,25(197→208) + 0,14(197→209) + 0,21(197→214)	1,85
796	4,98	– 0,17(185→199) + 0,12(189→199) + 0,13(192→199) + 0,48(193→199) – 0,36(194→199) + 0,10(198→204)	0,36
769	5,59	– 0,13(193→199) + 0,60(198→204) + 0,25(198→207)	0,41
742	5,91	0,10(191→199) – 0,11(194→199) + 0,60(196→199) – 0,11(196→204) + 0,12(197→199) + 0,19(197→208)	0,43
674	5,95	0,10(191→199) – 0,11(194→199) + 0,60(196→199) – 0,12(196→204) + 0,11(197→199) + 0,19(197→208)	0,33

Электронный спектр молекулы ИК-3 в ДМФА рассчитан для 20 одноэлектронных возбуждений в области 600–900 нм показывает, что

в указанном спектральном интервале находятся только три электронных перехода (таблица 3).

Таблица 3 – Рассчитанный электронный спектр поглощения молекулы ИК-3 в области 600–900 нм

Длина волны, нм	Энергия перехода, эВ	Разложение волновых функций по однократно возбужденной конфигурации	Сила осциллятора (f)
769	1,61	$0,38(198 \rightarrow 200) + 0,23(199 \rightarrow 200) + 0,78(195 \rightarrow 199) + 0,26(196 \rightarrow 199) + 0,26(198 \rightarrow 200)$	1,58
732	1,69	$-0,11(198 \rightarrow 200) - 0,21(195 \rightarrow 199) + 0,96(196 \rightarrow 199)$	0,64
601	2,06	$0,33(198 \rightarrow 200) + 0,30(199 \rightarrow 200) - 0,48(195 \rightarrow 199) + 0,73(198 \rightarrow 200)$	0,27

Возбуждение электрона с 195 МО на 199 МО дает главный вклад в полосу поглощения при 769 нм (таблица 3). Доказано, что метод TDHF/6-31G наиболее точно описывает геометрические параметры и электронные строения плоских молекул: M₁₃, M₁₂, PA-100, PA-101, а методы TDDFT/B3LYP/6-311++G*, TDDFT/B3LYP/6-311G** и TDDFT/B3LYP/6-311++G*, содержащие диффузные и поляризационные функции, с высокой точностью подходят для компьютерного моделирования объемных молекул M₃H, ИК-2, ИК-3, AAFOX-1, AAFOX-7, AAFOX-8, соответственно.

В четвертой главе приведены результаты изучения спектрально-поляризационных, ориентационных и физико-химических свойств пленочных поляризаторов, содержащих йод, дихроичные красители и наночастицы Au, ZnO, Fe₃O₄ и их композиты с дихроичными агентами. Установлено, что для всех окрашенных, растянутых ПВС-пленок наблюдается одинаковый характер зависимости степени поляризации (СП) от содержания в них дихроичного компонента. Найдено, что для всех испытанных нами красителей максимум на кривой зависимости СП от концентрации красителя наблюдается при его содержании 0,18–0,41 мас. % (таблица 4). Кривая зависимости степени поляризации от одноосного растяжения пленки (Rs) имеет сложный характер и описывается полиномиальной функцией, позволяющей рассчитать значение СП в любой точке кривой от содержания дихроичного компонента. Для всех красителей максимальная степень поляризации наблюдается при Rs = 3,0–4,5. Растяжение окрашенной ПВС-пленки больше, чем в 5,0 раз, сопровождается снижением ее степени поляризации, что связано с изменением ориентации красителя в результате конформационной перестройки полимерных молекул [1–А–4–А, 9–А, 14–А, 15–А, 30–А, 31–А].

На основе ПВС, смесей синтезированных и коммерческих красителей (1–6) изготовлены анизотропные пленки, поляризующие свет в УФ- и

видимой областях спектра (таблица 5). Смеси красителей М₁₃, РА-100, РА-101, ААFOX-1, ААFOX-7, ААFOX-8 и КК, М₂, М₁₂ и CSB использовались для расширения спектрального диапазона ПВС-пленки. Спектральный диапазон поляризации света этими пленками и их поляризующая способность (таблица 5) свидетельствуют о возможности использования указанных смесей для формирования широкополосных поляризаторов.

Таблица 4 – Спектрально-поляризационные характеристики ПВС-пленок в зависимости от содержания красителя

Краситель	[C], мас. %	R _s	κ , %	κ _⊥ , %	СП, %
ИН	0,10	3,0	69,1	37,2	30,0
	0,18	3,0	51,7	16,1	53,0
	0,27	3,0	44,1	5,8	77,0
	0,36	3,0	25,1	0,5	96,0
	0,27	4,5	47,7	3,3	87,0
ТР	0,10	3,0	43,1	8,7	66,0
	0,27	3,0	34,6	6,7	68,0
	0,37	3,0	24,6	2,7	80,0
	0,47	3,0	15,2	1,8	78,0
	0,37	5,0	56,4	4,0	87,0
ХК	0,10	3,0	54,7	10,7	67,0
	0,18	3,0	51,6	1,1	96,0
	0,22	3,0	50,0	7,2	75,0
	0,27	3,0	49,6	7,4	74,0
	0,32	3,0	47,8	6,6	76,0
	0,18	3,5	54,7	0,6	98,0
М₁	0,10	3,0	66,9	18,8	56,0
	0,14	3,0	56,6	10,1	70,0
	0,18	3,0	34,8	1,6	91,0
	0,50	3,0	51,3	12,3	61,0
	0,18	2,5	31,6	1,3	92,0
ПЧ	0,22	3,0	44,8	4,0	83,0
	0,32	3,0	29,6	2,2	86,0
	0,41	3,0	26,0	0,6	95,0
	0,52	3,0	13,2	0,5	93,0
	0,62	3,0	10,1	0,4	92,0
М_{3Н}	0,20	3,0	70,0	3,3	91,0
	0,40	3,0	63,0	0,5	98,0
	0,60	3,0	53,0	0,3	99,0
ИК-2	0,20	4,0	82,6	61,0	15,0
	0,30	4,0	62,4	4,5	87,0
	0,40	4,0	52,8	1,0	96,0
	0,40	3,0	50,5	9,2	69,0
	0,40	5,0	65,0	10,5	72,0

Таблица 5 – Поляризующая способность ПВС-пленок, окрашенных M_{13} в смесях с другими дихроичными красителями

Смесь	Ближняя УФ область		Видимая область	
	λ , нм	Степень поляризации, %	λ , нм	Степень поляризации, %
1 (M_{13} – КК – РА-100)	280–370	90,0–95,0	443–565	90,0–97,0
2 (M_{13} – M_2 – РА-101)	280–340	90,0–96,0	536–592	90,0–93,0
3 (M_{13} – M_{12} – КК – ААFOX-1)	285–400	94,0–97,0	400–560	95,0–98,0
4 (M_{13} – M_{12} – M_2 – ААFOX-7)	295–400	94,0–96,0	400–590	96,0–98,0
5 (CSB – M_{13} – M_2 – M_{12} – ААFOX-8)	297–400	92,0–97,0	400–685	94,0–97,0
6 (CSB – КК – M_{13} – M_{12})	272–400	90,0–99,0	400–693	95,0–98,0

В качестве дихроичного компонента в смесях {ИК-2 + M_{12} + M_2 + ЧС + ИК-1}**15**, { M_3H + ЧС + ИК-1}**16** и { M_{13} + M_{12} + КК + ЧС + ИК-1}**17**, обеспечивающего поляризацию в ближней ИК области ($\lambda_{\max}$ 830 нм) использовали соединение ИК-1. Из окрашенного ПВС смесями, содержащими этот краситель, можно получить ПВС-пленки, поляризующие свет в ближней УФ- 330–400 нм, видимой- 400–700 нм и ближней ИК 700–880 нм областях спектра. Добавление 0,1 мас. % красителя ИК-1 в ПВС-пленку сопровождается появлением полос поглощения при $\lambda_{\max}$ 858, 876 и 867 нм в композициях **15**, **16** и **17**, соответственно (таблица 6).

Таблица 6 – Спектральный диапазон и поляризующая способность ПВС-пленок, окрашенных смесями дихроичных красителей **15–17**

Состав смеси	Ближняя УФ область		Видимая область		Ближняя ИК область			
	λ , нм	СП, %	λ , нм	СП, %	λ , нм	СП, %	λ , нм	СП, %
15 {ИК-2(0,3) + M_{12} (0,3) + M_2 (0,3) + ЧС(0,3) + ИК-1(1,0)}	330–400	98,0–99,0	400–700	86,0–99,0	750	68,0	858	90,0
16 { M_3H (0,4) + ЧС(0,2) + ИК-1(1,0)}	330–400	85,0–87,0	400–700	81,0–99,0	750	79,0	876	90,0
17 { M_{13} (0,15) + M_{12} (0,15) + КК(0,15) + ЧС(0,15) + ИК-1(1,0)}	330–400	85,0–91,0	400–700	78,0–98,0	750	77,0	867	90,0

Разработанные анизотропные пленки поляризуют свет в УФ- (330–400 нм), видимой- (400–700 нм) и ближней ИК областях (858–876 нм) спектра при степени растяжения 3,5–4,0 раза. Введение ИК-1 в ПВС-пленки вызывает

усиление поглощения электромагнитного излучения в ближней ИК области спектра [1–А, 2–А, 4–А, 6–А, 9–А, 14–А, 15–А, 30–А, 31–А, 43–А].

Спектры поглощения стержнеобразных НЧ Au (длина/диаметр = 3,5) в воде содержат две полосы с $\lambda_{\max}$ при 528 и 752 нм (рисунок 5 а). В ориентированной ПВС-пленке ($R_S = 4,0$) эти полосы батохромно сдвигаются на 9,0 и 28,0 нм, соответственно, что связано с изменением показателя преломления полимерной матрицы. Полученная ПВС-пленка окрашена в розовый цвет и прозрачна. Это свидетельствует о том, что коллоидные стержнеобразные НЧ Au диспергируются в матрицу ПВС-пленки. Спектры пропускания ПВС-пленки в параллельном ($T_{||}$) и перпендикулярном ($T_{\perp}$) направлениях относительно оси ее растяжения (рисунок 5 б) свидетельствуют об оптической анизотропии пленки, связанной со стержнеобразной формой и соответствующей ориентацией НЧ Au. При концентрациях НЧ Au в ПВС-пленке от 0,02 до 0,05 мас. % СП увеличивается от 26,4 до 48,9 %, а при содержании 0,06 мас. % НЧ уменьшается до 46,2 % (таблица 7).

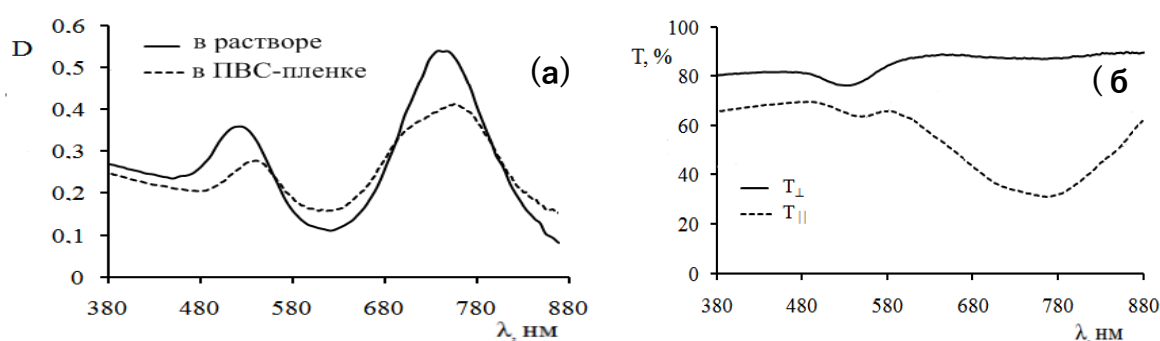


Рисунок 5 – Спектры поглощения НЧ Au в неполяризованном свете (а) и пропускания ориентированной ПВС-пленки с НЧ Au в поляризованном свете (б)

Стержнеобразные НЧ Au обладают дихроизмом в области спектра (380–880 нм) и могут быть использованы как дихроичный агент при создании пленочных поляризаторов (рисунки 5 а, б).

Таблица 7 – Оптические параметры ПВС-пленок при различных концентрациях НЧ Au; $R_S = 4,0$; $\lambda_{\max}$ 763–765 нм

Концентрация НЧ Au, мас. %	$T_{\perp}$, %	$T_{ }$, %	$D_{\perp}$	$D_{ }$	СП, %
0,02	72,8	42,4	0,14	0,37	26,4
0,03	78,1	38,7	0,11	0,41	33,7
0,05	89,1	30,6	0,05	0,51	48,9
0,06	82,1	30,2	0,09	0,52	46,2

При концентрациях НЧ Au выше 0,05 мас. % происходит агрегация НЧ, что сопровождается изменением СП, $T_{||}$ и $T_{\perp}$. Синтезированные

стержнеобразные НЧ Au могут “работать” как дихроичный агент, увеличивая СП пленок, окрашенных смесями $\{M_3H, CSB, M_{14}\}$ и $\{M_{13}, M_{12}, CR, CSB, M_{14}\}$ (таблица 8).

Таблица 8 – Поляризующая способность широкополосных ПВС-пленок, окрашенных смесями дихроичных красителей и стержнеобразными НЧ Au

Дихроичный агент в пленке (мас. %)	Области					
	УФ		Видимая		Ближняя ИК	
	λ , нм	СП, %	λ , нм	СП, %	λ , нм	СП, %
$M_3H(0,2), CSB(0,2), M_{14}(0,4)$	302–400	90,0–99,0	400–695	98,0–99,0	818–850	90,0–99,0
$M_3H(0,2), CSB(0,2), M_{14}(0,4), НЧ Au(0,05)$	305–400	90,0–99,0	400–698	98,0–99,0	765–846	90,0–99,0
$M_{13}(0,1), M_{12}(0,2), CR(0,2), CSB(0,2), M_{14}(0,4)$	285–400	85,0–91,0	400–697	98,0–99,0	818–847	90,0–99,0
$M_{13}(0,1), M_{12}(0,2), CR(0,2), CSB(0,2), M_{14}(0,4), НЧ Au(0,05)$	285–400	85,0–91,0	400–697	98,0–99,0	766–850	90,0–99,0

При содержании 0,05 мас. % НЧ Au в ПВС-пленке с красителями $\{M_3H, CSB, M_{14}\}$ СП поляризатора составляет 90,0–99,0 % при λ 305–400 нм и 98,0–99,0 % при λ 400–698 нм. Для композиции с $\{M_3H, CSB, M_{14}, НЧ Au\}$ и $\{M_{13}, M_{12}, CR, CSB, M_{14}, НЧ Au\}$ нижний спектральный диапазон «работы» поляризаторов в ближней ИК области расширяется на 54 и 52 нм, соответственно.

При изучении фотохимических свойств многокомпонентных систем «ПВС-краситель» особый интерес вызывает роль НЧ в их стабилизации при воздействии УФ излучения. Синтезированные стержнеобразные НЧ ZnO (рисунок 6), совместимы с матрицей ПВС, не вызывают гелеобразование и понижение светопропускания ПВС-пленок.



Рисунок 6 – Фотография НЧ ZnO (длина 1,0 мкм, диаметр 85,0 нм)

Наночастицы ZnO поглощают по всей исследуемой области от 300 до 800 нм. В этом спектральном диапазоне значения D меняются от 0,7 до 0,4, соответственно (рисунок 7).

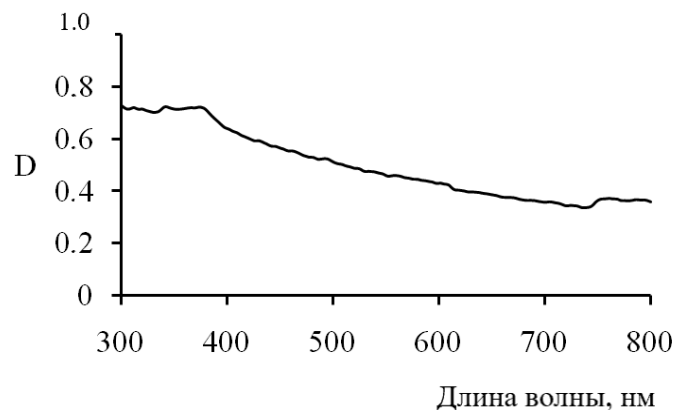


Рисунок 7 – Спектр поглощения НЧ ZnO

При этом увеличение концентрации НЧ ZnO в ПВС-пленке до 1,0 мас. % не влияет на спектральные характеристики ПВС-пленок (рисунок 8).

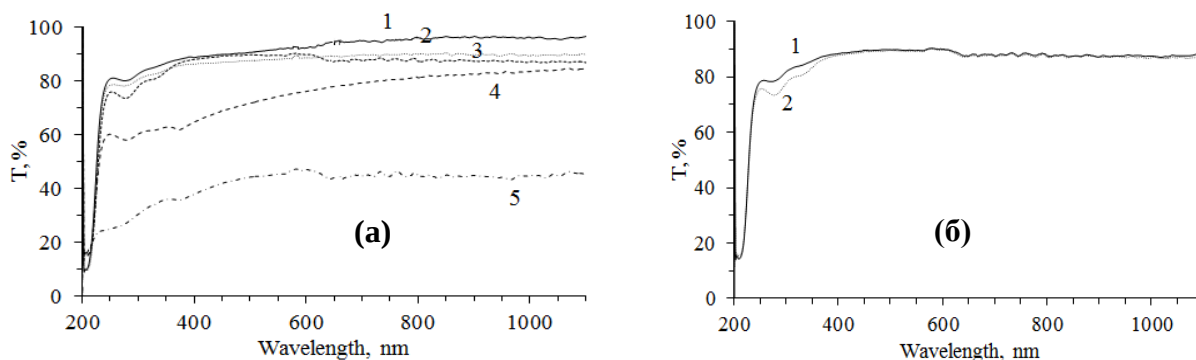
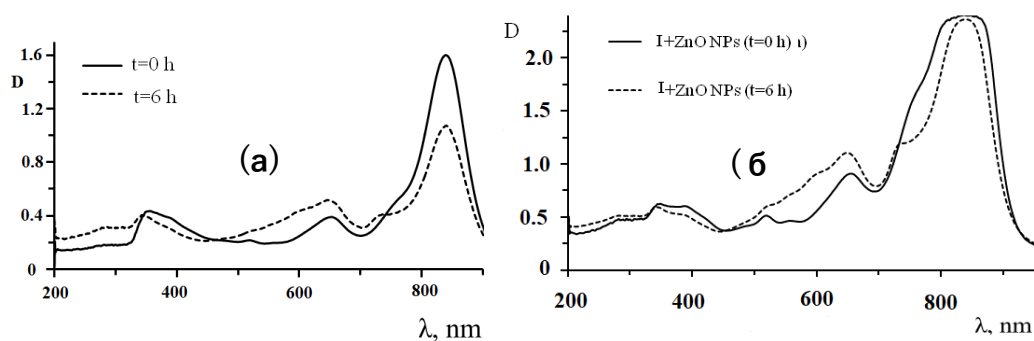


Рисунок 8 – Спектры пропускания НЧ ZnO в ПВС-пленке:

а – концентрация НЧ ZnO: 1 – 0,2, 2 – 0,5, 3 – 1,0, 4 – 2,0 и 5 – 4,0 мас. %, **б** – концентрация НЧ ZnO = 1,0 мас. %, 1 – $T_{\perp}$ и 2 – $T_{\parallel}$

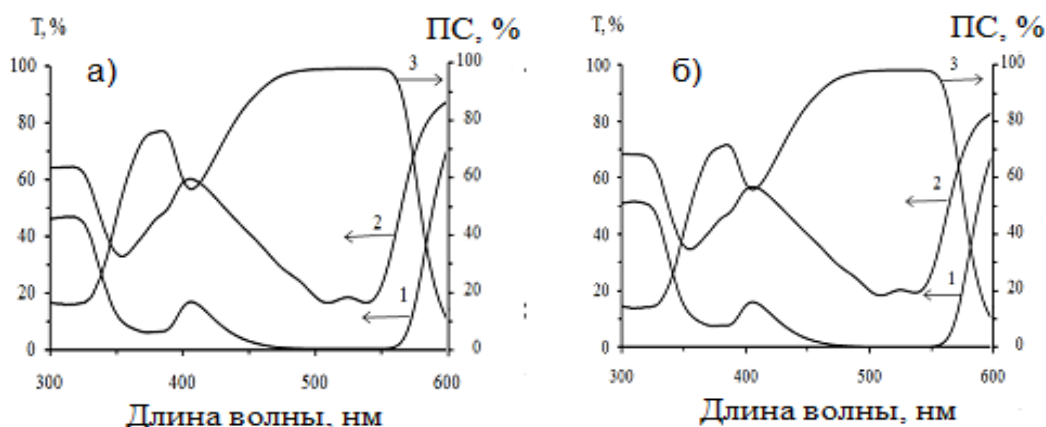
Дальнейшее увеличение концентрации НЧ ZnO сопровождается снижением светопропускания образцов (рисунок 8 а). Дихроизм не наблюдается при введении НЧ ZnO в ПВС-пленку (рисунок 8 б).

Облучение пленок, содержащих ИК-2, приводит к уменьшению интенсивности поглощения в максимуме полос поглощения при λ 845 нм (рисунок 9 а). Это указывает на фотопревращение дихроичного компонента и разрушение сопряженных двойных связей в молекуле красителя. Однако, включение НЧ ZnO в ПВС-пленку, содержащую ИК-2 приводит к увеличению светостойкости образцов, облученных в течение 6 часов (рисунок 9 б).



**Рисунок 9 – Спектры оптической плотности ПВС-пленок:
а – 0,4 мас. % ИК-2, б – 0,4 мас. % ИК-2 и 1,0 % НЧ ZnO**

Пленки, окрашенные Конго Красным с НЧ ZnO, также показали высокую устойчивость к УФ излучению (рисунок 10).



**Рисунок 10 – Спектры пропускания и поляризующей способности ПВС-пленки,
окрашенной КК с добавкой НЧ ZnO. 1 – $T_{||}$, 2 – $T_{\perp}$, 3 – ПС;
концентрация красителя 0,2 мас. %; время УФ-облучения (часы): 0 (а), 6 (б)**

Раствор ИР-3 в ДМФА в области спектра 550–850 нм имеет два четко выраженных максимума поглощения при 602 и 761 нм. Растворение ИР-3 в воде сопровождается уменьшением его интенсивности поглощения примерно в 2 раза и сдвигом максимумов экстинкции в коротковолновую область спектра при λ 580 и 675 нм. Кроме того, в спектре обнаруживается плечо в области 800 нм. В ПВС-пленке наблюдается bathochromic смещение полос поглощения ИР-3 (таблица 9), вызванное межмолекулярным взаимодействием между полимером и красителем, а также изменением энергетического состояния связей в молекулах и макромолекулах в результате одноосной ориентации. С ростом концентрации ИР-3 в пленке уменьшается параметр $S_{кр}$, так как усиливаются межмолекулярные взаимодействия между молекулами красителя, приводящие к изменению его ориентационного распределения в полимерной матрице [1–А–5–А, 9–А, 10–А, 14–А, 17–А, 24–А, 30–А, 31–А, 36–А, 37–А].

Таблица 9 – Спектрально-поляризационные характеристики анизотропных ПВС-пленок при различном содержании IR-3; (λ_{max} 781–785 нм)

[IR-3], мас. %	$T_{\perp}$, %	$T_{\parallel}$, %	$D_{\perp}$, %	$D_{\parallel}$, %	$S_{\text{кр}}$	T_0 , %	ПС, %
0,2	51,0	1,5	1,82	0,29	0,63	26,3	94,0
0,3	17,0	0,8	2,09	0,77	0,36	8,9	91,0
0,4	2,9	0,8	2,09	1,54	0,10	1,9	58,0

Введение наночастиц CeO_2 в ПВС-пленку с IR-3 приводит к увеличению ПС от 24,0 до 81,0 % при концентрации НЧ от 0,5 до 1,7 мас. % (таблица 10). Совместное применение НЧ Fe_3O_4 и CeO_2 сопровождается уменьшением ПС при содержании НЧ 1,0 и 1,7 мас. % по сравнению с ПВС-пленками с CeO_2 , что связано с дезориентацией полимерных цепей.

Таблица 10 – Спектральные характеристики ПВС-пленок, окрашенных красителем IR-3 с добавкой различных наночастиц

Образец пленки	С, мас. %	λ , нм	ПС, %
IR-3/ CeO_2	0,3/0,5	781–785	24,0
IR-3/ CeO_2	0,3/1,0	781–785	53,0
IR-3/ CeO_2	0,3/1,7	781–785	81,0
IR-3/ $\text{Fe}_3\text{O}_4/\text{CeO}_2$	0,3/0,5	781–785	23,0
IR-3/ $\text{Fe}_3\text{O}_4/\text{CeO}_2$	0,3/1,0	781–785	31,0
IR-3/ $\text{Fe}_3\text{O}_4/\text{CeO}_2$	0,3/1,7	781–785	45,0

ПВС-пленка, окрашенная CSB, эффективно поляризует свет в спектральном диапазоне 594–690 нм с ПС до 97,0 %. Введение наночастиц Fe_3O_4 , CeO_2 , никеля (Ni) и композита Fe_3O_4 и CeO_2 в окрашенные CSB ПВС-пленки не ухудшило их спектральных характеристик, по сравнению с другими красителями (таблица 11). При введении наночастиц Fe_3O_4 в окрашенные CSB пленки, как и в случае с IR-3 в сочетании с Fe_3O_4 , происходит расширение спектрального диапазона «работы» пленочного материала при 584–693 нм с ПС до 98,0 % по сравнению с пленкой, окрашенной только красителем CSB при 594–690 нм с ПС до 97,0 %.

Таблица 11 – Спектральные характеристики окрашенных CSB ПВС-пленок, содержащих наночастицы CeO_2 и Fe_3O_4

Краситель/наночастица	С, мас. %	λ , нм	ПС, %
CSB	0,3	594–690	90,0–97,0
CSB/ Fe_3O_4	0,3/0,6	584–693	90,0–98,0
CSB/ $\text{Fe}_3\text{O}_4/\text{CeO}_2$	0,3/1,7	649–678	90,0–93,0
CSB/ CeO_2	0,3/1,7	595–689	90,0–97,0

В случае окрашенной CSB ПВС-пленки, содержащей Fe_3O_4 увеличивается ее максимальное поглощение в спектральном диапазоне 584–693 нм по сравнению с ПВС-пленкой, окрашенной только CSB при λ 594–690 нм. Введение НЧ CeO_2 в композит CSB/ CeO_2 практически не влияет на оптические свойства поляризатора. Композиция, содержащая CSB/ Fe_3O_4 / CeO_2 , вызывает сокращение «рабочего» диапазона пленочного поляризатора.

Теплопроводность пленок измеряли в Государственном технологическом университете «Азад» (г. Тебриз, Иран) индикаторным методом определения степени анизотропии теплопроводности (χ) полимеров с помощью комплексного оборудования марки LC-201 (фирма Фринкл, Швеция). Все окрашенные и ориентированные ПВС-пленки обладают резко выраженной χ , что подтверждает анизотропность структуры полимерной матрицы. Причиной такой анизотропии является краситель, поскольку в неокрашенной пленке разница между значениями $\eta_{\parallel}$ и $\eta_{\perp}$ значительно меньше. Для окрашенных пленок в направлении, параллельном оси растяжения, теплопроводность мало отличается от неокрашенной пленки и практически не зависит от природы красителя. Значения χ для ПВС-пленок в присутствии красителя увеличиваются из-за уменьшения $\eta_{\perp}$ при незначительном изменении $\eta_{\parallel}$ (таблица 12).

Таблица 12 – Теплопроводность $\eta_{\parallel}$ и $\eta_{\perp}$ и анизотропия теплопроводности (χ) ПВС-пленок с красителями

Краситель	$C_{\text{кр}}$, мас. %	$\eta_{\parallel}$, Вт/(м.°C)	$\eta_{\perp}$, Вт/(м.°C)	χ
-	0,0	0,88	0,75	1,20
CSB	0,3	0,87	0,09	9,67
M_1	0,3	0,83	0,08	10,37
M_3H	0,3	0,85	0,04	21,25
M_{13}	0,3	0,86	0,07	12,29
AAFOX-1	0,3	0,86	0,10	8,60
AAFOX-7	0,3	0,87	0,11	7,91
AAFOX-8	0,3	0,86	0,11	7,82
PA-100	0,3	0,88	0,12	7,33
PA-101	0,3	0,87	0,10	8,70
IR-2	0,3	0,88	0,07	12,57
IR-3	0,3	0,89	0,08	11,10

Введение наночастиц Cu^{+2} , Ni^{+2} , Au^{+3} , Fe_3O_4 и CeO_2 в полимерную матрицу приводит к существенному изменению свойств композиционных материалов: оптических, теплофизических, электрических, что позволяет получить полимерные материалы со строго заданными свойствами и, тем самым, расширить области их применения. В присутствии НЧ Au и ZnO в полимерной матрице увеличивались значения анизотропии

теплопроводности (χ) окрашенных дихроичными красителями ПВС-пленок: существенный рост χ (до 300,0) наблюдался при введении в пленку НЧ Au.

Введение НЧ магнетита (Fe_3O_4) в ПВС-пленку, окрашенную IR-3, сопровождается значительным ростом анизотропии теплопроводности (χ): так, для пленки, содержащей только краситель значение χ составляет 8,2, а при концентрации Fe_3O_4 до 0,4 мас. % увеличивается до 445,0.

Введение цериевых частиц и $\text{Fe}_3\text{O}_4/\text{CeO}_2$ в ПВС-пленки, окрашенные IR-3 и CSB, в большей степени уменьшает величину $\eta_{\perp}$ (таблица 13), чем в случае образцов без частиц (таблица 12). С повышением концентрации НЧ от 0,5 до 1,7 мас. % растет анизотропия теплопроводности ПВС-пленок (таблица 13). Так, при 0,5 мас. % цериевых частиц и $\text{Fe}_3\text{O}_4/\text{CeO}_2$ значение χ пленок составляет 63,1 и 106,5, соответственно, а с ростом концентрации χ увеличивается до 173,8 и 144,8. ПВС-пленки, окрашенные CSB и содержащие НЧ, характеризуются меньшей величиной анизотропии теплопроводности, а самые низкие значения χ получены для окрашенных пленок, содержащих наночастицы Ni/Co, Ni и Cu (таблица 13) [5–А, 10–А, 14–А, 17–А, 18–А].

Таблица 13 – Теплопроводность ($\eta_{\parallel}$ и $\eta_{\perp}$) и анизотропия теплопроводности (χ) окрашенных ПВС-пленок, содержащих наночастицы $\text{Fe}_3\text{O}_4/\text{CeO}_2$, Ni/Co, Ni и Cu

Краситель/частицы	С (мас. %)	$\eta_{\parallel}$, Вт/(м.°С)	$\eta_{\perp}$, Вт/(м.°С)	χ
IR-3/ CeO_2	0,3/0,5	0,884	0,014	63,1
	0,3/1,7	0,869	0,005	173,8
IR-3/ $\text{Fe}_3\text{O}_4/\text{CeO}_2$	0,3/0,5	0,852	0,008	106,5
	0,3/1,4	0,869	0,006	144,8
CBS/ CeO_2	0,3/1,7	0,870	0,016	54,4
CBS/ $\text{Fe}_3\text{O}_4/\text{CeO}_2$	0,3/1,7	0,869	0,008	108,6
CBS/Ni	0,2/0,25	0,874	0,100	8,7
IR-3/Ni	0,3/0,3	0,875	0,091	9,6
IR-3/Ni/Co	0,2/12,5	0,834	0,097	8,6
IR-3/Cu	0,2/0,5	0,833	0,083	10,4
AAFOX-1/Ni/Co	0,15/6,6	0,848	0,044	19,3
AAFOX-7/Cu	0,2/0,5	0,864	0,057	15,2

Строение молекул красителей, их концентрация и степень упорядоченности в полимерной матрице влияют на поляризующую способность одноосно ориентированных окрашенных ПВС-пленок. Повышение электронодонорности ауксохрома ($-\text{NO}_2$, $-\text{OH}$, $-\text{SO}_3$), введенного в бензольные кольца молекул азокрасителей и сопряженного с цепочкой двойных связей приводит к росту интенсивности полосы длинноволнового поглощения красителя, усиливает ее сдвиг в красную область спектра (600–700 нм) и повышает дихроизм окрашенных ПВС-пленок. Эта закономерность

может быть использована при выборе и прогнозировании оптических свойств красителей в качестве дихроичных компонентов поляризационных пленок.

В пятой главе рассматриваются устройства с повышенным выходом поляризованного света для разных областей спектра.

Модель для широкого спектрального диапазона от 350 до 850 нм позволяет решить задачу достижения высокой степени поляризации до 0,99 широкополосного со спектральной шириной от 350 до 850 нм и широкоапертурного с угловой расходимостью в призме $\pm 8^\circ$ светового пучка при уменьшении aberrаций его волнового фронта. Это позволило предложить поляризационный делитель, который включает две призмы и многослойное тонкопленочное покрытие между ними, состоящее из двух периодических подструктур. Каждая из подструктур сформирована 10 парами слоев из материалов с большим отношением показателей преломления $n_1/n_2 \geq 1,4$.

Установлено, что оптимальной является следующая геометрия:

1–5-ая пара: $\text{Nb}_2\text{O}_5 = 75,0$ нм, $\text{SiO}_2 = 114,0$ нм;

6–10-ая пара: $\text{Nb}_2\text{O}_5 = 107,0$ нм, $\text{SiO}_2 = 163,0$ нм.

Для первой подструктуры толщины слоев материалов с показателями преломления $n_{1,2}$ равны соответственно $d_{1,2} = \lambda_{01}/4n_{1,2}$. Для второй подструктуры толщины слоев материалов с показателями преломления $n_{1,2}$ определяются выражениями $d_{3,4} = \lambda_{02}/4n_{1,2}$. Здесь λ_{01} и λ_{02} – длины волн, соответствующие центрам фотонных запрещенных зон (областей высокого отражения), имеющих максимальное перекрытие спектральных областей с наиболее сильным отражением s- и пропусканием p- поляризованных волн. Угол между оптической осью падающего на многослойное покрытие светового пучка и нормалью к поверхности многослойного покрытия равен углу Брюстера для границы раздела между материалом призмы и материалом слоя с показателем преломления n_1 . Такой поляризационный делитель содержит входную 1 и выходную 2 призмы (рисунок 11 а, б). Между призмами расположено многослойное тонкопленочное покрытие 3. Поляризационный делитель работает следующим образом. Неполяризованный световой пучок 4 падает на входную грань призмы 1, преломляется и распространяется в призме 1 до многослойного тонкопленочного покрытия 3. Угол падения пучка на входную грань призмы 1 выбирается таким образом, чтобы угол между оптической осью падающего на многослойное покрытие светового пучка и нормалью к поверхности многослойного покрытия был равен углу Брюстера. Многослойное тонкопленочное покрытие 3 пропускает световой пучок одной поляризации, а именно p-поляризованный, и отражает световой пучок ортогональной поляризации (s-поляризованный). Световой пучок с s-поляризацией выходит

из поляризатора через выходную грань призмы 1, а р-поляризованный – через выходную грань призмы 2.

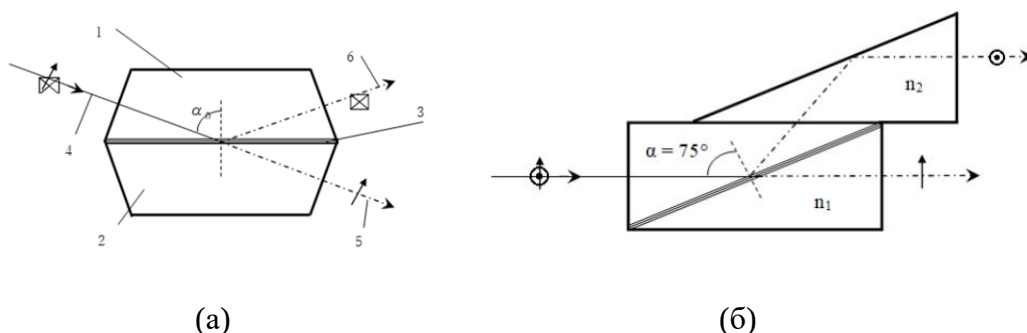


Рисунок 11 – Оптические схемы (а) и (б) поляризационных делителей

Разработаны поляризующие устройства с повышенным выходом поляризованного света для видимой (435, 548 и 611 и 625 нм) и широкого спектрального диапазона (380–650 и 350–850 нм) [47–А].

В шестой главе приведены технологический процесс изготовления пленочного поляризатора на основе поливинилового спирта и синтезированных дихроичных красителей (рисунок 12), состав запатентованного оптически прозрачного чувствительного к давлению клея, материальный баланс по отдельным стадиям суммарного процесса, требования и нормы ТУ на поляризатор с красителем и характеристики пленочного поляризатора, изготовленного по разработанной технологии. Дается сравнительный анализ зарубежных и созданных поляризаторов.

Технология изготовления пленочного поляризатора с расширенным диапазоном температур эксплуатации для УФ-, видимой- и ближней ИК областей спектра является составной частью разработанного процесса получения пленочных поляризаторов на основе поливинилового спирта, содержащего органический дихроичный краситель. Опытная линия, созданная для реализации этой технологии, позволяет получать поляризаторы просветного (пропускающего), отражающего и полупросветного типов. Технологический процесс получения просветного поляризатора с красителем включает ряд основных стадий и вспомогательных операций (рисунок 12) [14–А, 15–А, 29–А, 36–А–42–А].

Основные стадии:

- приготовление исходной композиции для отлива ПВС-пленок;
- отлив и сушка окрашенных ПВС-пленок;
- химическая обработка и одноосная вытяжка ПВС-пленок;
- термофиксация ориентированных ПВС-пленок;
- заклеивание поляризационной пленки двумя защитными триацетатцеллюлозными (ТАЦ) пленками;
- нанесение на поверхность поляризатора липкого адгезионного слоя.

Вспомогательные операции:

- приготовление растворов добавок, вводимых в исходную композицию для отлива ПВС-пленок, в том числе раствора красителя;
- фильтрование и деаэрация готовой композиции;
- приготовление растворов для химической обработки пленок;
- приготовление клея для склеивания поляризационной пленки с защитными ТАЦ-пленками; приготовление оптически прозрачного чувствительного к давлению клея для формирования на поверхности поляризатора адгезионного липкого слоя;
- изготовление антиадгезионной пленки из полиэтилентерфталата (ПЭТФ);
- защита липкого слоя антиадгезионной ПЭТФ-пленкой.

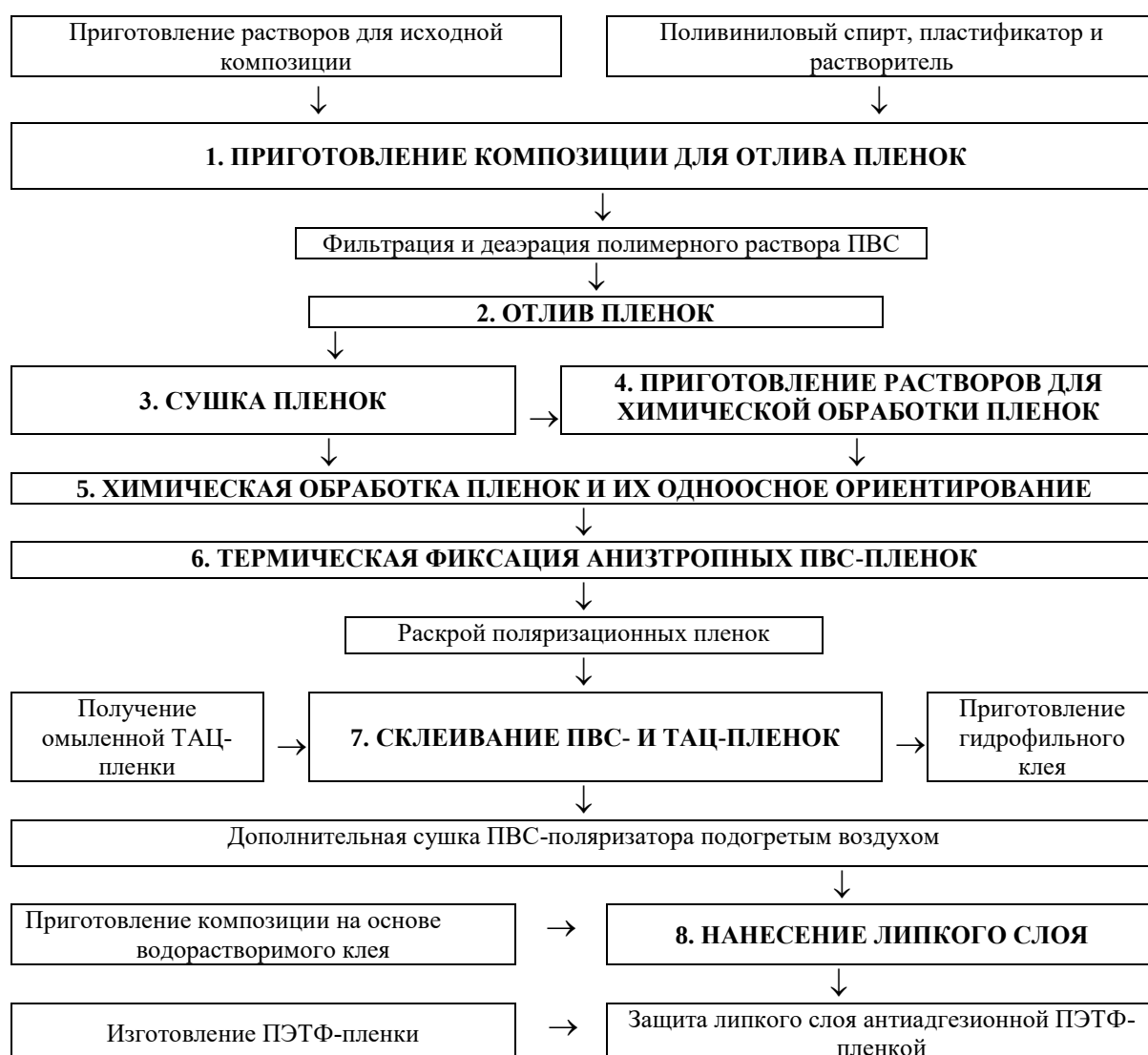


Рисунок 12 – Технологическая схема изготовления пленочного поляризатора пропускающего типа с дихроичным компонентом МзН (МАРШРУТ ПРОЦЕССА)

В соответствии с разработанными техническими условиями технологического процесса изготовления пленочного поляризатора с красителем ПВС-пленки соответствуют требованиям и нормам ТУ на поляризаторы (ТУ РБ 14568632.001–97, ТУ РБ 14559587.001–97).

Разработанный поляризатор предназначен для использования в жидкокристаллических устройствах отображения информации. Экспериментальные образцы испытаны в УП «Дисплей» (Минск), который занимается производством ЖК-индикаторов (рисунок 13).

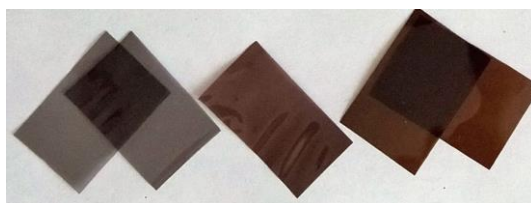


Рисунок 13 – Поляризатор для ЖК-индикаторов на основе ПВС и МЗН

По сравнению с поляризаторами зарубежных фирм, таких как Япония («Nitto», «Arisawa», «Polatechno Sales Co. LTD», «Sunritz Electronic Co. LTD»), Южная Корея («Ace Digitech») и США («Polaroid») экспериментальные образцы поляроидных пленок интенсивнее поглощают в перпендикулярном состоянии и имеют более высокий эффект поляризации даже при $R_s = 3,0$. Для повышения светопропускания пленок необходимо увеличивать их вытяжку. Образцы поляризационных пленок заклеены ТАЦ-пленками, на поверхность одной из которых нанесен адгезионный липкий слой. Образцы выдержали циклическое изменение температуры от $-60,0\text{ }^{\circ}\text{C}$ до $+90,0\text{ }^{\circ}\text{C}$, испытания на безотказность (при повышенных температурах, в течение 500 часов), а также климатические испытания по ускоренному типу на воздействие температуры $55,0\text{ }^{\circ}\text{C}$ при влажности $(90,0 \pm 5,0)\%$ в течение 4 суток (таблица 14) [1–А-4–А, 9–А, 14–А, 15–А, 29–А, 36–А-42–А].

Таблица 14 – Сравнение экспериментальных образцов поляроидных пленок с зарубежными аналогами (толщина поляризатора 240 ± 10 мкм) при $\lambda_{\max}$

Поляризационная пленка	Пропускание одинарной пленки, %	Пропускание в перпендикулярном состоянии, %	ЭП, %
с ИН	43,4	2,9	93,0
с ХК	52,2	4,8	91,0
с ПЧ	45,6	1,7	97,0
с МЗН	46,7	1,1	98,0
Япония	55,8	4,5	85,0
Япония	55,3	3,6	84,0
Япония	54,0	3,1	86,0
Япония	38,2	3,4	88,0
Южная Корея	56,5	2,5	83,0
США	53,7	5,2	87,0

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Основные научные результаты диссертации

1. Квантово-химическим моделированием (равновесных геометрических параметров, энергий граничных орбиталей, вертикальных возбуждений и электронных спектров) установлены структуры новых дихроичных красителей, перспективных для создания поляризационных ПВС-пленок, работающих в широком спектральном диапазоне (УФ-, видимой- и ближней ИК областях спектра) [5–А-7–А, 10–А-22–А, 25–А-39–А, 41–А, 51–А, 53–А, 58–А, 59–А, 61–А, 65–А, 74–А, 85–А-87–А].

2. На основе результатов квантово-химического моделирования осуществлен направленный синтез 11 новых дихроичных азосоединений, производных азометина, бифенила, оксима и хинолина, с максимумами поглощения в УФ-, видимой- и ближней ИК областях спектра для различных длин волн в интервале 270–870 нм [6–А-8–А, 11–А, 13–А-32–А, 35–А-43–А, 45–А, 64–А, 66–А, 67–А, 82–А, 90–А].

3. Разработаны новые композиции, содержащие от одного до шести компонентов, для:

УФ- и видимой областей спектра на основе ПВС и смесей дихроичных красителей, поглощающие в интервале длин волн 280–688 нм и поляризующей способности 90,0–99,8 %.

УФ-, видимой- и ближней ИК областей спектра, поглощающие в интервале длин волн 285–876 нм и поляризующей способности 78,0–99,0 %.

Поляризующая способность окрашенной ПВС-пленки увеличивалась с ростом концентрации дихроичного красителя и их смесей, достигая максимального значения при его содержании от 0,18 до 0,4 мас. %. Показано, что поляризующая способность растет с увеличением степени растяжения ПВС-пленки, достигает максимального значения при вытяжке пленки в 3,0–5,0 и несколько уменьшается при дальнейшем ее удлинении [46–А]. Зависимость поляризующей способности и степени одноосного растяжения ПВС-пленки от концентрации красителя имеет экстремальный характер, что связано с изменением конформации цепных макромолекул и перестройкой надмолекулярной структуры полимерной матрицы в результате ориентационной деформации. Повышение поляризующей способности ориентированной ПВС-пленки сопровождается ростом степени упорядоченности структур дихроичных агентов в полимерной матрице.

При введении в полимерную матрицу красителя производного хинолина (IR-3, см. стр. 5) и наночастиц Fe_3O_4 и их смеси значительно повышается устойчивость ПВС-пленок к ультрафиолетовому излучению по сравнению с образцами, содержащими только IR-3, о чем свидетельствуют высокие

значения их светопропускания и поляризующей способности (более 90,0 %) после облучения [15–А].

Введение наночастиц магнетита (Fe_3O_4) в ПВС-пленку, окрашенную IR-3, сопровождается значительным ростом анизотропии теплопроводности (χ): так, для пленки, содержащей только краситель значение χ составляет 8,2, а при концентрации Fe_3O_4 до 0,4 мас. % увеличивается до 445,0 [15–А]. Добавление цериевых частиц и $\text{Fe}_3\text{O}_4/\text{CeO}_2$ в ПВС-пленки, окрашенные IR-3 и дисазокрасителем Чикагским Синим 6Б (CSB), в большей степени уменьшает величину $\eta_{\perp}$, чем в случае образцов без частиц [1–А]. С повышением концентрации наночастиц от 0,5 до 1,7 мас. % растет анизотропия теплопроводности ПВС-пленок. При 0,5 мас. % цериевых частиц и $\text{Fe}_3\text{O}_4/\text{CeO}_2$ значение χ пленок составляет 63,1 и 106,5, соответственно, а с ростом концентрации χ увеличивается до 173,8 и 144,8 [60–А]. ПВС-пленки, окрашенные CSB и содержащие наночастицы, характеризуются меньшей величиной анизотропии теплопроводности, а самые низкие значения χ получены для окрашенных пленок, содержащих наночастицы Ni/Co, Ni и Cu [78–А].

Введение нанодобавок различной природы Cu^{+2} , Ni^{+2} , Au^{+3} , Fe_3O_4 и CeO_2 в полимерную матрицу приводит к существенному изменению свойств композиционных материалов: оптических, теплофизических, электрических, что позволяет получить полимерные материалы со строго заданными свойствами и, тем самым, расширить области их применения.

При увеличении степени вытяжки в направлении основных связей полимерной матрицы теплопроводность растет и достигает максимума, а в направлении побочных связей – уменьшается до минимума. Анизотропия структуры окрашенных ПВС-пленок формируется при совместном действии модификатора – дихроичного красителя и ориентационно-деформационных сил [1–А–4–А, 8–А–10–А, 13–А–17–А, 23–А, 24–А, 30–А, 36–А, 38–А, 39–А, 42–А, 43–А, 46–А, 47–А, 50–А, 53–А, 54–А, 56–А, 57–А, 60–А, 63–А, 69–А–72–А, 75–А–81–А, 84–А, 88–А–90–А].

4. Впервые изготовлены одноосно окрашенные анизотропные ПВС-пленки с новыми [3–А] и коммерческими [8–А] дихроичными органическими красителями, обладающими положительным дихроизмом и поляризующей способностью 97,0–99,0 % при длинах волн, соответствующих максимальному поглощению индивидуальных красителей [46–А]. Уникальным дихроичным агентом, обеспечивающим поляризацию света в широком диапазоне видимой области спектра 300–650 нм является краситель производный нафталинсульфокислоты (M_3H) (см. стр. 4) [3–А, 8–А]. Разработан технологический процесс изготовления поляризаторов на основе ПВС и красителей с повышенной влагуостойчивостью (90 %) и

термостойкостью (от $-60,0$ °С до $+90,0$ °С). Получены экспериментальные образцы всех видов поляризаторов для разных областей спектра и проведены их климатические испытания, в том числе в составе жидкокристаллических индикаторов [8–А, 14–А-16–А, 19–А, 25–А-40–А, 42–А, 43–А, 46–А-50–А, 52–А, 53–А, 55–А, 59–А, 62–А, 63–А, 68–А-73–А, 75–А-78–А, 83–А, 88–А].

5. Впервые разработаны устройства с повышенным выходом поляризованного света для видимого и широкого спектрального диапазона от УФ- до ближней ИК областей спектра, которые обеспечивают высокую степень поляризации до 0,99 широкополосного со спектральной шириной от 350 до 850 нм и широкоапертурного с угловой расходимостью в призме $\pm 8^\circ$ светового пучка при уменьшении аберраций его волнового фронта [44–А, 71–А, 91–А].

Рекомендации по практическому использованию результатов

Разработаны новые подходы квантово-химического моделирования дихроичных красителей, перспективных для использования в создании поляризационных пленок на основе ПВС, поглощающих в УФ-, видимой- и ближней ИК областях спектра.

Изготовленные из ПВС, синтезированных дихроичных красителей и наночастиц Fe_3O_4 , ZnO , CeO_2 , узкополосные и широкополосные поляризационные пленки для УФ-, видимой- и ближней ИК областей спектра прошли эксплуатационные испытания и могут быть применены в составе жидкокристаллических индикаторов и устройств.

Создана опытно-промышленная установка по изготовлению на основе ПВС и широкополосного красителя M_3H поляризатора с повышенной свето-, влаго- и термостойкостью с производительностью 400 M^2 в год. Опытно-промышленные партии поляризаторов переданы по спецзаказам в НПО «Дисплей», ОАО «Интеграл», ООО «Регула» и ОАО «Оптик».

Разработаны:

1. Курсы лекций по дисциплинам: «Компьютерное моделирование биологически активных веществ», «3D-моделирование» и «Визуализация медико-биологической информации» и электронный учебно-методический комплекс «3D-моделирование» для студентов II ступени обучения факультета экологической медицины Международного государственного экологического института им. А.Д. Сахарова Белорусского государственного университета.

2. Образцы поляризаторов использованы в учебном процессе на физическом факультете Белорусского государственного университета.

Список публикаций соискателя ученой степени

Статьи в рецензируемых научных журналах

1–А. Влияние структуры органических красителей на теплопроводность окрашенных поливинилспиртовых пленок / С.Н. Шахаб, Н.Г. Арико, В.Е. Агабеков, Л.Н. Филиппович // Вес. Нац. акад. навук Беларусі. Сер. хім. навук. – 2009. – № 4. – С. 58–68.

2–А. Теплофизические свойства окрашенных пленочных поляризаторов / С.Н. Шахаб, Н.Г. Арико, В.Е. Агабеков, Л.Н. Филиппович // Вес. Нац. акад. навук Беларусі. Сер. хім. навук. – 2012. – № 2. – С. 45–49.

3–А. Spectral properties of polarizing films containing mixture of dichroic dyes / H.A. Almodarresiyeh, S.N. Shahab, V.E. Agabekov, N.G. Ariko // Вес. Нац. акад. навук Беларусі. Сер. хім. навук. – 2013. – № 3. – С. 55–59.

4–А. Синтез наночастиц золота в присутствии компонентов поляризационной пленки / А.В. Абакшонок, В.Е. Агабеков, Х.А. Алмодарресие, С.Н. Шахаб, А.Н. Еремин // Вес. Нац. акад. навук Беларусі. Сер. хім. навук. – 2014. – № 1. – С. 14–24.

5–А. Квантово-химическое моделирование азосоединений, поглощающих в ближней ИК-области спектра / С.Н. Шахаб, Х.А. Алмодарресие, В.М. Зеленковский, В.Е. Агабеков // Вес. Нац. акад. навук Беларусі. Сер. хім. навук. – 2014. – № 4. – С. 32–36.

6–А. Electronic structure and absorption spectra of Sodium 2-Hydroxy-5-({2-Methoxy-4[(4-Sulfophenyl)Diazenyl]Phenyl}Diazenyl)Benzoate / H.A. Almodarresiyeh, S.N. Shahab, V.M. Zelenkovsky, V.E. Agabekov // J. of Appl. Spectroscopy. – 2014. – Vol. 81, № 1. – P. 161–163.

7–А. Calculation of UV, IR, and NMR spectra of Diethyl 2,2'-[(1,1'-Biphenyl)-4,4'-Diylbis(Azanediyl)]Diacetate / H.A. Almodarresiyeh, S.N. Shahab, V.M. Zelenkovskij, N.G. Ariko, L.N. Filippovich, V.E. Agabekov // J. of Appl. Spectroscopy. – 2014. – Vol. 81, № 1. – С. 57–61.

8–А. Получение и оптические свойства широкополосных поливинилспиртовых пленок, окрашенных смесью дихроичных красителей / Х.А. Алмодарресие, С.Н. Шахаб, Л.Н. Филиппович, Н.Г. Арико, В.Е. Агабеков // Доклады НАН Беларуси. – 2014. – Т. 58, № 1. – Р. 31–36.

9–А. Investigation of reaction conditions on morphology and optical properties of Zinc Oxide Nanorods / H.A. Almodarresiyeh, A.V. Abakshonok, V.E. Agabekov, A.N. Eryomin, S.N. Shahab // Materials Science and Engineering: A. 2014. – Vol. 64. – P. 1–5.

10–А. A study of molecular structure, UV, IR and ¹H NMR spectra of a new dichroic dye on the basis of quinoline derivative / S. Shahab, H. Almodarresiyeh,

R. Kumar, M. Darroudi // J. of Molecular Structure. – 2015. – Vol. 1088. – P.105–110.

11–A. Molecular structure and spectroscopic investigation of sodium (E)-2-hydroxy-5-((4-sulfatophenyl) benzoate: A DFT study / S. Shahab, R. Kumar, M. Darroudi, M. Yousefzadeh Borzehandani // J. of Molecular Structure. – 2015. – Vol. 1083. – P.198–203.

12–A. Photochromic properties of the molecule Azure A chloride in PVA matrix / S. Shahab, L. Filippovich, R. Kumar, M. Darroudi, M. Yousefzadeh Borzehandani, M. Gomar, F. HajiHajikolaee // J. of Molecular Structure. – 2015. – Vol. 1101. – P. 109–115.

13–A. Molecular structure and UV-Vis spectral analysis of new synthesized azo dyes for application in polarizing films / S. Shahab, F. HajiHajikolaee, L. Filippovich, M. Darroudi, V.A. Loiko, R. Kumar, M. Yousefzadeh Borzehandani // Dyes a. Pigments. – 2016. – Vol. 129. – P. 9–17.

14–A. Broad band thermostable polarizing film based on poly(vinyl alcohol), a quinoline derivative and ZnO nanoparticles / H.A. Almodarresiyeh, S. Shahab, L. Filippovich, R. Kumar, A. Lugovsky, V. Agabekov // RSC Advances. – 2016. – Vol. 6, № 48. – P. 42062–42068.

15–A. IR-Polarizing film containing a new quinoline dye and Fe₃O₄ nanoparticles: optical and thermophysical investigations / S. Shahab, L. Filippovich, M. Yousefzadeh Borzehandani, R. Kumar, A. Lugovsky, A. Eryomine, M. Mashayekhi // RSC Advances. – 2016. – Vol. 6, № 115. – P. 114613–114622.

16–A. Synthesis of biphenyl derivative and its application as dichroic materials in poly (vinyl alcohol) polarizing films / S. Shahab, H.A. Almodarresiyeh, L. Filippovich, R. Kumar, M. Darroudi, F. HajiHajikolaee // J. of Molecular Structure. – 2016. – Vol. 1107. – P. 19–24.

17–A. Geometry optimization and excited state properties of the new symmetric (E)-Stilbene derivative for application in thermostable polarizing PVA-Films: a combined experiment and DFT approach / S. Shahab, H.A. Almodarresiyeh, L. Filippovich, F. HajiHajikolaee, R. Kumar, M. Darroudi, M. Mashayekhi // J. of Molecular Structure. – 2016. – Vol. 1119. – P. 423–430.

18–A. Quantum chemical modeling of new derivatives of (E,E)-azomethines: synthesis, spectroscopic (FT-IR, UV/Vis, polarization) and thermophysical investigations / S. Shahab, M. Sheikhi, L. Filippovich, E.A. Dikisar, H. Yahyae // J. of Molecular Structure. – 2017. – Vol. 1137. – P. 335–348.

19–A. Polarization, excited states, trans-cis properties and anisotropy of thermal and electrical conductivity of the 4-(phenyldiazenyl)aniline in PVA matrix

/ S. Shahab, L. Filippovich, M. Sheikhi, R. Kumar, E. Dikumar, H. Yahyaei, A. Muravsky // J. of Molecular Structure. – 2017. – Vol. 1141. – P. 703–709.

20–A. Synthesis, geometry optimization, spectroscopic investigations (UV/Vis, excited states, FT-IR) and application of new azomethine dyes / S. Shahab, M. Sheikhi, L. Filippovich, R. Kumar, E. Dikumar, H. Yahyaei, M. Khaleghian // J. of Molecular Structure. – 2017. – Vol. 1148. – P. 134–149.

21–A. Photochromic properties of the N-Salicylideneaniline in Polyvinyl Butyral matrix: experimental and theoretical investigations / S. Shahab, L. Filippovich, M. Aharodnikova, H.A. Almodarresiyeh, F. HajiHajikolaee, R. Kumar, M. Mashayekhi // J. of Molecular Structure. – 2017. – Vol. 1134. – P. 530–537.

22–A. Interaction between new synthesized derivative of (E,E)-azomethines and BN(6,6-7) nanotube for medical applications: Geometry optimization, molecular structure, spectroscopic (NMR, UV/Vis, excited state), FMO, MEP and HOMO-LUMO investigations / M. Sheikhi, S. Shahab, L. Filippovich, M. Khaleghian, E. Dikumar, M. Mashayekhi // J. of Molecular Structure. – 2017. – Vol. 1146. – P. 881–888.

23–A. M. Sheikhi. Quantum chemical modeling of 1-(1,3-Benzothiazol-2-yl)-3-(thiophene-5-carbonyl)thiourea: molecular structure, NMR, FMO, MER and NBO analysis based on DFT calculations / M. Sheikhi, S. Shahab // J. of Phys. a. Theoretical Chemistry. – 2017. – Vol. 13, № 3. – P. 277–288.

24–A. Quantum Chemical Modeling of N-(2-benzoylphenyl) oxalamate: Geometry Optimization, NMR, FMO, MEP and NBO Analysis Based on DFT Calculations / M. Sheikhi, A. Ramazani, S. Shahab // Journal of Physical and Theoretical Chemistry. – 2017. – Vol. 14. – P. 35–47.

25–A. Spectroscopic (polarization, excited state, FT-IR, UV/Vis and ^1H NMR) and thermophysical investigations of new synthesized azo dye and its application in polarizing Film / S. Shahab, L. Filippovich, M. Sheikhi, H. Yahyaei, M. Aharodnikova, R. Kumar, M. Khaleghian // American Journal of Materials Synthesis and Processing. – 2017. – Vol. 5, № 2. – P. 17–23.

26–A. Thermostable polarizing film on the basis of poly (vinyl alcohol) and new dichroic synthesized azo dye for optical applications: theoretical and experimental investigations / S. Shahab, L. Filippovich, M. Sheikhi // Chemical Methodologies. – 2017. – Vol. 2. – P. 170–184.

27–A. Синтез (E,E)-азометиноксимоў на основе оксима 4-аминоацетофенона / Е.А. Дикусар, Л.Н. Филиппович, С.Н. Шахаб, С.К. Петкевич, С.Г. Степин // Вес. Нац. акад. навук Беларусі. Сер. хім. навук. – 2018. – Т. 54, № 2. – С. 168–179.

28–А. Синтез (Е,Е)-азометинов на основе 4-аминоазобензола / Е.А. Дикусар, Л.Н. Филиппович, С.Н. Шахаб, С.К. Петкевич, С.Г. Степин // Вест. Нац. акад. наук Беларуси. Сер. хим. наук. – 2018. – Т. 54, № 2. – С. 58–71.

29–А. New derivatives of (E,E)-azomethines: design, quantum chemical modeling, spectroscopic (FT-IR, UV/Vis, polarization) studies, synthesis and their applications: experimental and theoretical investigations / M. Sheikhi, S. Shahab, L. Filippovich, H. Yahyaei, E. Dikusar, M. Khaleghian // J. of Molecular Structure. – 2018. – Vol. 1152. – P. 368–385.

30–А. Design of geometry, synthesis, spectroscopic (FT-IR, UV/Vis, excited state, polarization) and anisotropy (thermal conductivity and electrical) properties of new synthesized derivatives of (E,E)-azomethines in colored stretched poly (vinyl alcohol) matrix / S. Shahab, M. Sheikhi, L. Filippovich, E. Dikusar, H. Yahyaei, R. Kumar, M. Khaleghian // J. of Molecular Structure. 2018. – Vol. 1157. – P. 536–550.

31–А. Spectroscopic studies (Geometry optimization, E→Z isomerization, UV/Vis, excited states, FT-IR, HOMO-LUMO, FMO, MEP, NBO, polarization) and anisotropy of thermal and electrical conductivity of new azomethine dyes in stretched polymer matrix / S. Shahab, M. Sheikhi, L. Filippovich, M. Khaleghian, E. Dikusar, H. Yahyaei, M. Yousefzadeh Borzehandani // Silicon. – 2018. – Vol. 10, № 5. – P. 2361–2385.

32–А. DFT investigations (geometry optimization, UV/Vis, FT-IR, NMR, HOMO-LUMO, FMO, MEP, NBO, excited states) and the synthesis of new pyrimidine dyes / M. Sheikhi, S. Shahab, L. Filippovich, E. Dikusar, M. Khaleghian // Chin. J. of Structural Chemistry. 2018. – Vol. 37, № 8. – P. 1201–1222.

33–А. Anisotropy (optical, electrical and thermal conductivity) in thin polarizing films for UV/Vis regions of spectrum: Experimental and theoretical investigations / H. Yahyaei, S. Shahab, M. Sheikhi, L. Filippovich, H.A. Almodarresiyeh, R. Kumar, E. Dikusar, M. Yousefzadeh Borzehandani, R. Alnajjar // Spectrochimica Acta Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy. 2018. – Vol. 192. – P. 343–360.

34–А. Thermostable broad band polarizing PVA-Film: Theoretical and experimental investigations / S. Shahab, L. Filippovich, H.A. Almodarresiyeh, M. Sheikhi, R. Kumar // Chin. J. of Structural Chemistry. 2018. – Vol. 37, № 2. – P. 186–197.

35–А. Optimization, Spectroscopic (FT-IR, Excited States, UV/Vis) Studies, FMO, ELF, LOL, QTAIM and NBO analyses and electronic properties of two new pyrimidine derivatives / S. Shahab, M. Sheikhi, L. Filippovich, Z. Ignatovich, K. Laznev, A. Muravsky, R. Alnajjar, S. Kaviani // Chin. J. of Structural Chemistry. 2019. – Vol. 38, № 10. – P. 1615–1639.

36–A. Spectroscopic (FT-IR, excited states, UV/Vis, polarization) properties, synthesis and quantum chemical studies of new azomethine derivatives / S. Shahab, M. Sheikhi, L. Filippovich, Z. Ihnatovich, E. Koroleva, M. Drachilovskaya, M. Atroshko, A. Pazniak // *Dyes and Pigments*. 2019. – Vol. 170. – P. 107–118.

37–A. Spectroscopic and thermophysical investigations of new synthesized azo dye and its application in polarizing film / S. Shahab, L. Filippovich, M. Sheikhi, M. Aharodnikova, R. Kumar, // *Revue Roumaine de Chimie*. 2019. – Vol. 64, № 7. – P. 551–559.

38–A. Optimization, Spectroscopic (Excited States, UV/Vis, Polarization) Studies, FMO, ELF, LOL, QTAIM, NBO Analysis and Electronic Properties of Two New Azomethine Derivatives: A Theoretical and Experimental Investigations / S. Shahab, M. Sheikhi, L. Filippovich, E. Dikumar, M. Darroudi, S. Kaviani, M. Atroshko, M. Drachilovskaya // *Russian J. of Physical Chemistry A*. 2020. – Vol. 94. – P. 1848–1865.

39–A. Quantum-chemical modeling, spectroscopic (FT-IR, excited states, UV/Vis, polarization, and Dichroism) studies of two new benzo [d] oxazole derivatives / S. Shahab, M. Sheikhi, L. Filippovich, R. Alnajjar, Z. Ihnatovich, K. Laznev, A. Strogova, M. Atroshko, M. Drachilovskaya // *J. of Molecular Structure*. 2020. – Vol. 1202. – P. 127–139.

40–A. (E,E)-дiazометины на основе нафталин-1,5-диамина и изучение их поляризационных свойств / Е.А. Дикусар, Л.Н. Филиппович, С.Н. Шахаб, С.К. Петкевич, С.Г. Степин // *Вест. Нац. акад наук Беларусі. Сер. хім. навук*. – 2020. – Т. 56, № 1. – С. 67–74.

41–A. Quantum chemical modeling, synthesis, FT-IR, ^1H NMR, ^{13}C NMR and UV/Vis of new azomethine derivatives / H. Erfo, S. Shahab, M. Sheikhi, R. Alnajjar, L. Peng // *J. of Molecular Structure*. 2020. – Vol. 1221. – P. 128–146.

42–A. Quantum Chemical Modeling, Synthesis, Spectroscopic (FT-IR, Excited States, UV/Vis) Studies, FMO, QTAIM, NBO and NLO Analyses of Two New Azo Derivatives / H. Erfo, S. Shahab, S.Al. Saud, W. Cheng, P. Lu, M. Sheikhi, R. Alnajjar, S. Kaviani // *J. of Molecular Structure*. 2021. – Vol. 18. – P. 56–77.

43–A. Two new dichroic dyes: Quantum chemical modeling, synthesis, optical properties and their application in polarizing films / S. Shahab, H. Yahyaei, M. Sheikhi, L. Filippovich, H. Zhou, S. Kaviani, R. Alnajjar, V. Potkin, E. Dikumar, S. Petkevich, V.E. Agabekov // *J. of Molecular Structure*. 2021. – Vol. 1239. – P. 324–336.

44–A. Broad-Band Polarizing Light Beam Splitter Based on a Multilayer Thin-Film Coating / V.E. Agabekov, N.S. Kazak, V.N. Belyi, S.N. Kurilkina,

A.A. Ryzhevich, S.N. Shahab, A.I. Mitkovets, A.G. Mashchenko // J. of Appl. Spectroscopy. – 2021. – Vol. 88, № 4. – P. 816–824.

45–А. Geometry Optimization, UV/Vis, NBO, HOMO and LUMO, Excited State and Antioxidant Evaluation of Pyrimidine Derivatives / S. Shahab, M. Sheikhi, E. Kvasyuk, A.G. Sysa, R. Alnajjar, A. Strogova, K. Sirotsina, H. Yurlevich, D. Novik // Letters in Organic Chemistry. – 2021. – Vol. 18, № 6. – P. 465–476.

Статьи в рецензируемых научных журналах, не входящих в перечень ВАК

46–А. Влияние природы дихроичного красителя и структуры полимера на спектральные и тепловые свойства пленочных поляризаторов / В.Е. Агабеков, Н.Г. Арико, С.Н. Шахаб, Л.Н. Филиппович, П.М. Малашко // Докл. БГУИР. – 2008. – № 5. – С.109–118.

47–А. Спектрально-поляризационные и теплофизические свойства поливинилспиртовых пленок с дихроичными красителями / В.Е. Агабеков, Н.Г. Арико, С.Н. Шахаб, Л.Н. Филиппович // Химия и технология новых веществ и материалов: сб. науч. ст. / НАН Беларуси, Ин-т физико-органической химии; редкол.: В.С. Солдатов [и др.]. – Минск, 2008. – С. 3–27.

48–А. New Mechanism of Photo alignment based on Reversible Intermolecular Bonds / A. Muravsky, U. Mahilny, V. Agabekov, N. Ariko, P. Malashko, S. Shachab // Display Week 2009. - San Antonio, Texas, USA, May 31-June 5, 2009. – P. 134–137.

49–А. New dyes for guest-host mode / A. Muravsky, V. Agabekov, N. Ariko, S. Shachab, A. Tolstik, P. Malashko // Semiconductor Physics, Quantum Electronics & Optoelectronics. 2010. – Vol. 13, № 3. – P. 286–289.

50–А. Широкополосные дихроичные поляризаторы / Х.А. Алмодарресие, С.Н. Шахаб, Л.Н. Филиппович, Н.Г. Арико, В.Е. Агабеков // Вестник МГОУ. Сер. «Физика - Математика». 2013. № 1. – С. 82–90.

51–А. Structure effect and orientation distribution of azo dyes on optical anisotropy of dyed PVA-films / L.N. Filippovich, N.G. Ariko, H.A. Almodarresiyeh, S.N. Shahab, P.M. Malashko, V.E. Agabekov // Semiconductor Physics, Quantum Electronics & Optoelectronics. 2013. – Vol. 16, № 2. – P. 220–223.

52–А. Поляризаторы на основе поливинилового спирта и пленки с наночастицами серебра: получение и применение (обзор) / В.Е. Агабеков, А.Л. Потапов, С.Н. Шахаб, Н.А. Иванова // Полимер. материалы и технологии. – 2015. – Т. 1, № 2. – С. 6–35.

53–А. Филиппович, Л.Н. Спектрально-поляризационные и теплофизические свойства поливинилспиртовых пленок, окрашенных новыми производными конго красного / Л.Н. Филиппович, С.Н. Шахаб, Е.А. Дикусар // Электронный периодический рецензируемый научный журнал «SCI-ARTICLE.RU». – 2015. – № 27. – С. 231–241.

Статьи в материалах научных конференций и сборниках

54–А. Поляризационные пленки для ближней УФ-области спектра / В.Е. Агабеков, Н.Г. Арико, Л.Н. Филиппович, С.Н. Шахаб, П.М. Малашко // Материалы II научной конференции Армянского химического общества / Новые материалы и процессы. 4–8 октября 2010 г., Ереван – Горис. – С. 45–48.

55–А. Термостабильность дихроичных поляризаторов на основе поливинилового спирта / Л.Н. Филиппович, Н.Г. Арико, С.Н. Шахаб, В.Е. Агабеков // Химические реактивы, реагенты и процессы малотоннажной химии: сб. науч. ст. / НАН Беларуси, Ин-т химии новых материалов; редкол.: В.Е. Агабеков [и др.]. – Минск, 2011. – С. 245–256.

56–А. Влияние компонентов поляризационной поливинилспиртовой пленки на синтез наночастиц золота / А.В. Абакшонок, А.Н. Еремин, В.Е. Агабеков, Х.А. Алмодарресие, С.Н. Шахаб // Фуллерены и наноструктуры в конденсированных средах: сб. науч. тр. VII Международной конференции / Нац. акад. наук Беларуси, Ин-т тепло- и массообмена; редк. П.А. Витязь [и др.] Минск, 2013. – С. 25–30.

57–А. Шахаб, С.Н. Фотохромные свойства молекулы динатриевой соли индиго-5,5'-дисульфокислоты: DFT исследование / С.Н. Шахаб // Междунар. журн. приклад. и фундамент. исслед. – 2015. – № 1. – С. 86–91.

58–А. Спектрально-поляризационные и теплофизические свойства поливинилспиртовых пленок с дихроичными красителями / В.Е. Агабеков, Н.Г. Арико, С.Н. Шахаб, Л.Н. Филиппович // Химия и технология новых веществ и материалов. Сборник трудов ИФОХ НАН Беларуси. Выпуск 2. Минск, 2016. – С. 3–27.

59–А. Поливинилспиртовые пленки, содержащие полиметиновый краситель и наночастицы магнетита / Л.Н. Филиппович, А.Н. Еремин, С.Н. Шахаб, А.П. Луговский, В.Е. Агабеков // Наноструктуры в конденсированных средах: сб. науч. ст. / НАН Беларуси, Ин-т тепло- и массообмена; редкол.: П.А. Витязь [и др.]. – Минск, 2016. – С. 371–377.

60–А. Влияние наночастиц магнетита на теплопроводность поливинилспиртовых пленок, окрашенных органическим красителем / Л.Н. Филиппович, С.Н. Шахаб, А.Н. Еремин, В.Е. Агабеков // Наноструктурные материалы – 2016: Беларусь – Россия – Украина:

материалы V Междунар. науч. конф., Минск, 22–25 нояб. 2016 г. / НАН Беларуси, Науч.-практ. центр НАН Беларуси по материаловедению; редкол.: П.А. Витязь [и др.]. – Минск, 2016. – С. 533–535.

61–А. Синтез (Е)-азометинов на основе 3-(4)-аминобензойных кислот, сульфаниламида и 4-аминоазобензола / Е.А. Дикусар, Л.Н. Филиппович, С.Н. Шахаб, С.К. Петкевич, С.Г. Степин // Вестн. фармации. – 2016. – № 4. – С. 45–53.

62–А. (Е,Е)-азометиноксими – производные 4-аминоацетофенона / Е.А. Дикусар, Л.Н. Филиппович, С.Н. Шахаб, С.К. Петкевич, С.Г. Степин // Вестн. фармации. – 2017. – № 2. – С. 54–64.

63–А. Теплопроводность и светостойкость окрашенных поливинилспиртовых пленок, содержащих цериевые частицы и их композит с магнетитом / Л.Н. Филиппович, С.Н. Шахаб, А.Н. Еремин, Н.А. Иванова, В.Е. Агабеков // Пленки и покрытия–2017: тр. 13-й Междунар. конф., 18–20 апр. 2017 г. / Ин-т проблем машиноведения Рос. акад. наук [и др.]; под ред. В. Г. Кузнецова. – СПб., 2017. – С. 295–298.

64–А. (Е,Е)-8,16-дiazометины на основе 1,5-диаминонафталина / Е.А. Дикусар, Л.Н. Филиппович, С.Н. Шахаб, С.К. Петкевич, С.Г. Степин // Вестн. фармации. – 2020. – № 2. – С. 47–57.

65–А. Синтез производных адамантана / Акишина Е.А., Казак Д.В., Дикусар Е.А., Петкевич С.К., Никитина Е.В., Филиппович Л.Н., Шахаб С.Н. // Международная конференция «НАУКА И ИННОВАЦИИ»: сборник научных трудов: 26 ноября, 2020 года / Министерство инновационного развития Республики Узбекистан, Центр передовых технологий. – Ташкент: Центр передовых технологий, 2020. – С. 5–8.

66–А. Almodarresiyeh H.Al. Optical and thermal anisotropy of thin-polyvinyl alcohol film modified by rod gold nanoparticles / Almodarresiyeh H.Al., Shahab S.N. // International Conference on Nanotechnology and Nanoscience. December 30, 2020. University of Tehran. Iran. 2020. – P. 2–16.

67–А. Композиционные пленки на основе поливинилового спирта с добавками полианилина и наночастиц магнетита, золота и серебра / Филиппович Л.Н., Игнатович Ж.В., Новик Х.А., Шумская Е.Е., Шахаб С.Н., Рогачев А.А., Подобед Л.Ф., Лобанова Е.П. // Пленки и покрытия – 2021. Труды 15-й Международной конференции. Россия, Санкт – Петербург 18–20 мая 2021 г. – С. 136–139.

Тезисы докладов

68–А. Dichroic polarizers for visible and ultraviolet areas of the spectrum / S. Shahab, L. Filippovich, N. Ariko, V. Agabekov // 15th International workshop on inorganic and organic electroluminescence and 2010 International conference on

the science and technology of emissive displays and lighting and XVIII advanced display technologies international symposium / St-Petersburg State Institute of Technology (Technical University). St-Petersburg, Russia. September 27 – October 01, 2010. – P. 150–151.

69–А. Технологический процесс изготовления дихроичных пленочных поляризаторов на основе поливинилового спирта / Агабеков В.Е., Арико Н.Г., Иванова Н.А., Космачева Т.Г., Кулевская И.В., Шахаб С.Н., Глоба И.Ю., Дайнеко О.А., Филиппович Л.Н. // Материалы II научной конференции по химии и химической технологии / ИОНХ – ЕРЕВАН 2010. 13–17 сентября 2010 г., Армения, Ереван. – 2010. – С. 158–159.

70–А. Термостабильность дихроичных поляризаторов на основе поливинилового спирта / Л.Н. Филиппович, Н.Г. Арико, С.Н. Шахаб, В.Е. Агабеков // 23-я Международная научно-техническая конференция «Реактив 2010», 27–29 октября 2010 г. Минск (Беларусь). 2010. – С. 21.

71–А. Широкополосное поляризационное устройство / В.Е. Агабеков, Н.Г. Арико, С.Н. Шахаб, С.Н. Курилкина, А.Г. Машенко, Н.С. Казак // Тезисы докладов на XIX Международном симпозиуме «Перспективные технологии дисплеев и полупроводниковой осветительной техники». 28 февраля–4 марта 2011 г., Логойск. Республика Беларусь. 2011. – С.12.

72–А. Теплофизические свойства окрашенных пленочных поляризаторов / С.Н. Шахаб, Н.Г. Арико, Л.Н. Филиппович, В.Е. Агабеков // Тезисы докладов на XIX Международном симпозиуме «Перспективные технологии дисплеев и полупроводниковой осветительной техники». 28 февраля–4 марта 2011 г., Логойск. Республика Беларусь. 2011. – С. 13.

73–А. Шахаб С.Н. Компьютерное моделирование в процессе обучения химии / С.Н. Шахаб // Тезисы докладов научно-методической конференции «Непрерывное профессиональное образование: состояние и перспективы развития». 8–9 сентября 2011 г., Минск. Республика Беларусь. 2011. – С. 177–178.

74–А. Получение и свойства азокрасителей для широкополосных дихроичных поляризаторов / Л.Н. Филиппович, П.М. Малашко, Н.Г. Арико, Х.А. Алмодарресие, С.Н. Шахаб, В.Е. Агабеков // Химические реактивы, реагенты и процессы малотоннажной химии. Реактив – 2012. Тезисы XXVI Международной научно-технической конференции «Реактив - 2012». Минск, 2–4 октября 2012. – С. 41.

75–А. Влияние структуры и ориентационного распределения азокрасителей на оптическую анизотропию окрашенных ПВС-пленок / Л.Н. Филиппович, Н.Г. Арико, Х.А. Алмодарресе, С.Н. Шахаб, П.М. Малашко, В.Е. Агабеков // XX Международный симпозиум «Передовые дисплейные и

световые технологии – ADLT-2012». Тезисы докладов. Крым, Украина, 8–12 октября, 2012. – С. 22–23.

76–А. Широкополосные дихроичные поляризаторы / Х.А. Алмодарресие, С.Н. Шахаб, Л.Н. Филиппович, Н.Г. Арико, В.Е. Агабеков // Передовые дисплейные и световые технологии: тез. докл. 21-го Междунар. симп., Москва-Мытищи, 9–12 апреля 2013 г. / SID. ГОУ «Московский государственный областной университет. – Москва. – 2013. – С. 82.

77–А. Поливинилспиртовая пленка, содержащая наночастицы оксида цинка / Х.А. Алмодарресие, А.В. Абакшонок, С.Н. Шахаб, В.Е. Агабеков, А.Н. Еремин // XXVII Международная научно-техническая конференция «Реактив-2013», 21–25 октября 2013. г. Иркутск, Россия. 2013. – С. 64.

78–А. Влияние наночастиц металлов и их оксидов на теплопроводность поливинилспиртовых пленок, окрашенных органическими красителями / Х.А. Алмодарресие, Л.Н. Филиппович, С.Н. Шахаб, Н.Г. Арико, В.Е. Агабеков // Наноструктурные материалы – 2014: Беларусь, Россия, Украина. Материалы IV международной научной конференции. Беларусь, Минск. 7–10 октября 2014. г. Минск, Беларусь. 2014. – С. 185.

79–А. Polyvinyl alcohol films modified by organic dyes and zinc oxide nanoparticles / H.Al. Almodarresiyeh, L.N. Filippovich, S.N. Shahab, N.G. Ariko, V.E. Agabekov // Science and Applications of the Thin Films, Conference and Exhibition (SATF 2014). Izmir Institute of Technology. 15-19 September 2014. Turkey. Izmir. 2014. – P. 169

80–А. Оптические свойства поливинилспиртовых пленок, содержащих дихроичные красители и полианилин / Л.Н. Филиппович, С.Н. Шахаб, А.Н. Еремин, Н.А. Иванова // Полимерные композиты и трибология: Поликомтриб–2017: Междунар. науч.-техн. конф., Гомель, 27–30 июня 2017 г.: тез. докл. / НАН Беларуси [и др.]; редкол.: В. Н. Адери́ха [и др.]. – Гомель, 2017. – С. 105.

81–А. Стабилизация полианилина поливинилпирролидоном и карбоксиметилцеллюлозой / А.Н. Еремин, Х.А. Новик, Н.А. Иванова, Л.Н. Филиппович, С.Н. Шахаб // Полимерные композиты и трибология: Поликомтриб–2017: Междунар. науч.-техн. конф., Гомель, 27–30 июня 2017 г.: тез. докл. / НАН Беларуси [и др.]; редкол.: В.Н. Адери́ха [и др.]. – Гомель, 2017. – С. 116.

82–А. Изоникотинаты ванилина и изованилина / Филиппович Л.Н., Шахаб С.Н., Дикусар Е.А., Агабеков В.Е. // XXI Менделеевский съезд по общей и прикладной химии. 9–13 сентября 2019 г., СПб. Сб. тезисов в 6 томах. Т. 2а. Химия и технология материалов. СПб., 2019 – С. 396.

83–А. Тепло- и электропроводность окрашенных поливинилспиртовых пленок, содержащих полианилин и металлические наночастицы / Х.А. Новик,

Л.Н. Филиппович, С.Н. Шахаб, Ж.В. Игнатович, А.А. Рогачев, В.Е. Агабеков // Новые функциональные материалы, современные технологии и методы исследования – 2020: VI Республиканская научно-техническая конференция молодых ученых, посвященная памяти члена-корреспондента НАН Беларуси С.С. Песецкого. – Гомель, 9–11 ноября 2020 г.: тез. докл. / Государственное научное учреждение «Институт механики металлополимерных систем имени А.В. Белого НАН Беларуси». – Гомель, 2020. – С. 150–152.

84–А. Функциональные пленки на основе композита (Fe₃O₄/Au)PANI / А.В. Петкевич, Е.Е. Шумская, Л.Н. Филиппович, С.Н. Шахаб, Х.А. Новик, Ж.В. Игнатович, А.А. Рогачев // труды 63-й Всероссийской научной конференции МФТИ. Нано-, био-, информационные, когнитивные и социогуманитарные науки и технологии. 23–29 ноября 2020. Россия. Москва – Долгопрудный – Жуковский МФТИ 2020. – С. 99–101.

85–А. Квантово-химический расчет азометиновых соединений, обладающих антиоксидантной активностью / А.А. Строгова, С. Раад, М.А. Атрошко, С.Н. Шахаб // Сахаровские чтения 2020 года: экологические проблемы XXI века: материалы 20-й международной научной конференции, 21–22 мая 2020 г., г. Минск, Республика Беларусь: в 2 ч. / Междунар. гос. экол. ин-т им. А.Д. Сахарова Бел. гос. ун-та; редкол.: А.Н. Батян [и др.]; под ред. д-ра ф.-м.н., проф. С.А. Маскевича, к.т.н., доцента М.Г. Герменчук. – Минск: ИВЦ Минфина, 2020. – Ч. 2. – 2020. – С. 319–321.

86–А. Strogova A. Pyrimidine derivative: physicochemical properties / A. Strogova, M. Atroshko, S. Shahab // BELARUSIAN STATE UNIVERSITY. Establishment of Education «International Sakharov Environmental Institute». ACTUAL ENVIRONMENTAL PROBLEMS. Proceedings of the X International Scientific Conference of young scientists, graduates, master and PhD students November 19–20, 2020 Minsk, Republic of Belarus. 2020. – P. 118–119.

87–А. Spectroscopic studies (geometry optimization, E→Z isomerization, UV/Vis, excited states, FT-IR, HOMO-LUMO, FMO, MEP, NBO) of new azomethine structures for biological and biochemical applications / A. Pazniak, S. Shahab, M. Sheikhi, L. Filippovich // BELARUSIAN STATE UNIVERSITY. Establishment of Education «International Sakharov Environmental Institute». ACTUAL ENVIRONMENTAL PROBLEMS. Proceedings of the X International Scientific Conference of young scientists, graduates, master and PhD students November 21–22, 2019 Minsk, Republic of Belarus. 2019. – P. 196.

88–А. Almodarresiyeh H.A. Optical and thermal anisotropy of thin-polyvinyl alcohol film modified by rod gold nanoparticles / Almodarresiyeh H.A., Shahab S.N. // International Conference on Nanotechnology and Nanoscience. December 30, 2020. University of Tehran. Iran. 2020. – P. 111.

Патенты и заявки на изобретения

89–А. Композиция для получения поляризационной полимерной пленки для ближней УФ-области спектра: пат. ВУ 16604 / Агабеков Владимир Енокович, Арико Надежда Григорьевна, Филиппович Людмила Николаевна, Малашко Павел Митрофанович, Шахаб Сиямак Насер. – Оpubл. 30.12.2012.

90–А. 6-Амино-4-гидрокси-3-{[4-((фенил)азо)фенил]азо}-2-нафталинсульфокислота и ее применение: пат. ВУ 18134 / Агабеков Владимир Енокович, Арико Надежда Григорьевна, Филиппович Людмила Николаевна, Малашко Павел Митрофанович, Шахаб Сиямак Насер, Алхосейни Алмодарресие Хора Мохаммед Али. – Оpubл. 30.04.2014.

91–А. Поляризационный делитель: пат. ВУ 20399 / В. Е. Агабеков, С.Н. Курилкина, Н.С. Казак, В.Н. Белый, А.Г. Машенко, Н.Г. Арико, Шахаб Сиямак Насер. – Оpubл. 30.08.2016.

РЕЗЮМЕ

Шахаб Сиямак Насер

Пленочные поляризаторы различного функционального назначения, окрашенные дихроичными красителями

Ключевые слова: поливиниловый спирт, пленочный поляризатор, дихроичный краситель, поляризующая способность, квантово-химическое моделирование, термостабильность, теплопроводность.

Цель работы: создание пленочных поляризаторов различного функционального назначения, окрашенных дихроичными красителями для УФ-, видимой- и ближней ИК областей спектра с широким температурным интервалом.

Методы исследования: УФ-спектроскопия, ИК-спектроскопия, ЯМР-спектроскопия, индикаторный метод определения теплопроводности, оптическая анизотропия, метод Хартти-Фока, метод теории функционала плотности, сканирующая электронная микроскопия.

Полученные результаты и их новизна: впервые установлены физико-химические закономерности получения пленочных поляризаторов на основе поливинилового спирта и синтезированных дихроичных красителей для УФ-, видимой-, и ближней ИК областей спектра. Показано, что синтезированный краситель 6-амино-4-гидрокси-3-[[4-(фенилазо)фенил]азо]-2-нафталин сульфокислоты (M_3H) является уникальным дихроичным компонентом, обеспечивающим поляризацию света в широком диапазоне видимой области спектра 300–600 нм. Получены количественные зависимости поляризующей способности окрашенной ПВС-пленки от концентрации красителя и степени ее растяжения, на основе которых определены оптимальные условия получения пленки, обладающей степенью поляризации 97,0–98,0%. Установлено, что наряду с оптической анизотропией ориентированные окрашенные ПВС-пленки обладают анизотропией теплопроводности. По данным оптической анизотропии и анизотропии теплопроводности рассчитаны ориентационные параметры таких пленок и их количественная взаимосвязь с поляризующей способностью материала.

Рекомендации по использованию: впервые на основе синтезированного красителя M_3H создан пленочный поляризатор, выдерживающий температуру эксплуатации в пределах от $-60,0$ °C до $+90,0$ °C. Разработаны стадии технологического процесса получения отечественного поляризатора на опытно-промышленной линии, созданной для формирования поляризаторов на основе поливинилового спирта и дихроичных красителей.

Область применения: бытовая и промышленная электроника, приборостроение, медицинская техника, астрономия, машиностроение и др.

РЭЗЮМЭ

Шахаб Сіямак Насэр

Плёначныя палярызатары рознага функцыянальнага прызначэння, афарбаваныя дыхраічнымі фарбавальнікамі

Ключавыя словы: полівінілавы спірт, плёначны палярызатар, дыхраічны фарбавальнік, палярызацыйная здольнасць, квантава-хімічнае мадэляванне, тэрмастабільнасць, цеплаправоднасць.

Мэта працы: стварэнне плёначных палярызатараў рознага функцыянальнага прызначэння, афарбаваных дыхраічнымі фарбавальнікамі для УФ-, бачнай- і блізкай ІЧ абласцей спектра з шырокім тэмпературным інтэрвалам.

Метады даследавання: УЧ-спектраскапія, ІЧ-спектраскапія, ЯМР-спектраскапія, індыкатарны метады вызначэння цеплаправоднасці, аптычная анізатрапія, метады Харці-Фока, метады тэорыі функцыяналу шчыльнасці, скануючая электронная мікраскапія.

Атрыманыя вынікі і іх навізна: Упершыню ўстаноўлены фізіка-хімічныя заканамернасці атрымання плёначных палярызатараў на аснове полівінілавага спірту і сінтэзіраваных дыхраічных фарбавальнікаў для УЧ-, бачнай- і блізкай ІЧ абласцей спектра. Паказана, што сінтэзіраваны фарбавальнік 6-аміна-4-гідрокси-3-[[4-(фенілаза)феніл]аза]-2-нафталінсульфакіслаты (M_3H) з'яўляецца ўнікальным дыхраічным кампанентам, які забяспечвае палярызацыю святла ў шырокім дыпазоне бачнай вобласці спектра 300–600 нм. Атрыманы колькасныя залежнасці палярызацыйнай здольнасці афарбаванай ПВС-плёнкі ад канцэнтрацыі фарбавальніка і ступені яе расцяжэння, на падставе якіх вызначаны аптымальныя ўмовы атрымання плёнкі, якая валодае ступенню палярызацыі 97,0–98,0%. Устаноўлена, што разам з аптычнай анізатрапіяй арыентаваныя афарбаваныя ПВС-стужкі валодаюць анізатрапіяй цеплаправоднасці. Паводле даных аптычнай анізатрапіі і анізатрапіі цеплаправоднасці разлічаны арыентацыйныя параметры такіх плёнак і іх колькасная ўзаемасувязь з палярызацыйнай здольнасцю матэрыялу.

Рэкамендацыі па выкарыстанні: упершыню на аснове сінтэзіраванага фарбавальніка M_3H створаны плёначны палярызатар, які вытрымлівае тэмпературу эксплуатацыі ў межах ад $-60,0$ °C да $+90,0$ °C. Распрацаваны стадыі тэхналагічнага працэсу атрымання айчыннага палярызатара на доследна-прамысловай лініі, створанай для фарміравання палярызатараў на аснове полівінілавага спірту і дыхраічных фарбавальнікаў.

Вобласць выкарыстання: бытавая і прамысловая электроніка, прыборабудаўніцтва, медыцынская тэхніка, астраномія, машынабудаўніцтва і інш.

SUMMARY

Shahab Siyamak Naser

Film polarizers for various functional purposes colored by dichroic dyes

Key words: polyvinyl alcohol, film polarizers, dichroic dye, polarizing ability, quantum chemical modeling, thermal stability, thermal conductivity.

The aim of the work: development of film polarizers for various functional purposes colored by dichroic dyes for the UV, visible and near-IR regions of the spectrum with a wide temperature range.

Methods of research: UV spectroscopy, IR spectroscopy, NMR spectroscopy, indicator method for determining thermal conductivity, optical anisotropy, Harti-Fock method, density functional theory method, scanning electron microscopy.

The results obtained and their novelty: For the first time, the physicochemical regularities of obtaining film polarizers based on polyvinyl alcohol and synthesized dichroic dyes for the UV, visible, and near IR regions of the spectrum have been established. The synthesized dye 6-amino-4-hydroxy-3-[[4-(phenylazo)phenyl]azo]-2-naphthalene sulfonic acid (M_3H) is a unique dichroic component that provides polarization of light in a wide range of the visible spectral range 300–600 nm was shown. The quantitative dependences of the polarizing ability of a colored PVA film on the concentration of the dye and the degree of its stretching are obtained, on the basis of which the optimal conditions for development of film with a degree of polarization of 97,0–98,0% are determined. Oriented colored PVA films have both optical anisotropy and thermal conductivity anisotropy was found. The optical anisotropy and thermal conductivity anisotropy data were used to calculate the orientational parameters of such films and their quantitative relationship with the polarizing ability of the material.

Recommendations for use: for the first time, on the basis of the synthesized M_3H dye, a film polarizer has been developed that can withstand operating temperatures in the range from $-60,0\text{ }^{\circ}\text{C}$ to $+90,0\text{ }^{\circ}\text{C}$. The stages of the technological process of obtaining a domestic polarizer on a pilot industrial line created for the formation of polarizers based on polyvinyl alcohol and dichroic dyes have been developed.

Applications: consumer and industrial electronics, instrumentation, medical technology, astronomy, mechanical engineering, etc.

Подписано в печать 04.07.2023 Формат 60x84_{1/16} Бумага офсетная
Печать цифровая Усл.печ.л. 2,8 Уч.изд.л. 3,0 Тираж 60 экз. Заказ 5810
ИООО «Право и экономика» 220072 Минск Сурганова 1, корп. 2 Тел. 8 029 684 18 66
Отпечатано на издательской системе Gestetner в ИООО «Право и экономика»
Свидетельство о государственной регистрации издателя,
изготовителя, распространителя печатных изданий, выданное
Министерством информации Республики Беларусь 17 февраля 2014 г.
в качестве издателя печатных изданий за № 1/185