

ISSN 2224-5286

ҚАЗАҚСТАН РЕСПУБЛИКАСЫ
ҰЛТТЫҚ ҒЫЛЫМ АКАДЕМИЯСЫНЫҢ

Х А Б А Р Л А Р Ы

ИЗВЕСТИЯ

НАЦИОНАЛЬНОЙ АКАДЕМИИ НАУК
РЕСПУБЛИКИ КАЗАХСТАН

NEWS

OF THE ACADEMY OF SCIENCES
OF THE REPUBLIC OF KAZAKHSTAN

**ХИМИЯ ЖӘНЕ ТЕХНОЛОГИЯ
СЕРИЯСЫ**



**СЕРИЯ
ХИМИИ И ТЕХНОЛОГИИ**



**SERIES
CHEMISTRY AND TECHNOLOGY**

1 (409)

**ҚАҢТАР – АҚПАН 2015 ж.
ЯНВАРЬ – ФЕВРАЛЬ 2015 г.
JANUARY – FEBRUARY 2015**

**1947 ЖЫЛДЫҢ ҚАҢТАР АЙЫНАН ШЫҒА БАСТАҒАН
ИЗДАЕТСЯ С ЯНВАРЯ 1947 ГОДА
PUBLISHED SINCE JANUARY 1947**

**ЖЫЛЫНА 6 РЕТ ШЫҒАДЫ
ВЫХОДИТ 6 РАЗ В ГОД
PUBLISHED 6 TIMES A YEAR**

**АЛМАТЫ, ҚР ҰҒА
АЛМАТЫ, НАН РК
ALMATY, NAS RK**

Б а с р е д а к т о р

ҚР ҰҒА академигі
М. Ж. Жұрынов

Р е д а к ц и я а л қ а с ы :

хим. ғ. докторы, проф., ҚР ҰҒА академигі **Әдекенов С.М.**; хим. ғ. докторы, проф., ҚР ҰҒА академигі **Ғазалиев А.М.**; хим. ғ. докторы, проф., ҚР ҰҒА академигі **Ерғожин Е.Е.** (бас редактордың орынбасары); хим. ғ. докторы, проф., ҚР ҰҒА академигі **Пірәлиев К.Д.**; хим. ғ. докторы, проф., ҚР ҰҒА корр. мүшесі **Баешов А.Б.**; хим. ғ. докторы, проф., ҚР ҰҒА корр. мүшесі **Бүркітбаев М.М.**; хим. ғ. докторы, проф., ҚР ҰҒА корр. мүшесі **Жүсіпбеков У.Ж.**; хим. ғ. докторы, проф., ҚР ҰҒА корр. мүшесі **Итжанова Х.И.**; хим. ғ. докторы, проф., ҚР ҰҒА корр. мүшесі **Молдахметов М.З.**, техн. ғ. докторы, проф., ҚР ҰҒА корр. мүшесі **Мырхалықов Ж.У.**; мед. ғ. докторы, проф., ҚР ҰҒА корр. мүшесі **Рахымов К.Д.**; хим. ғ. докторы, проф., ҚР ҰҒА корр. мүшесі **Сатаев М.И.**; хим. ғ. докторы, проф., ҚР ҰҒА корр. мүшесі **Тәшімов Л.Т.**; хим. ғ. докторы, проф. **Мансұров З.А.**; техн. ғ. докторы, проф. **Наурызбаев М.К.**

Р е д а к ц и я к е ң е с і :

Беларусь Республикасының ҰҒА академигі **Агабеков В.Е.** (Беларусь); Украинаның ҰҒА академигі **Волков С.В.** (Украина); Қырғыз Республикасының ҰҒА академигі **Жоробекова Ш.Ж.** (Қырғызстан); Армения Республикасының ҰҒА академигі **Манташян А.А.** (Армения); Молдова Республикасының ҰҒА академигі **Туртэ К.** (Молдова); Әзірбайжан ҰҒА академигі **Фарзалиев В.** (Әзірбайжан); Тәжікстан Республикасының ҰҒА академигі **Халиков Д.Х.** (Тәжікстан); хим. ғ. докторы, проф. **Нараев В.Н.** (Ресей Федерациясы); философия ғ. докторы, профессор **Полина Прокопович** (Ұлыбритания); хим. ғ. докторы, профессор **Марек Сикорски** (Польша)

Главный редактор

академик НАН РК

М. Ж. Журинов

Редакционная коллегия:

доктор хим. наук, проф., академик НАН РК **С.М. Адекенов**; доктор хим. наук, проф., академик НАН РК **А.М. Газалиев**; доктор хим. наук, проф., академик НАН РК **Е.Е. Ергожин** (заместитель главного редактора); доктор хим. наук, проф., академик НАН РК **К.Д. Пралиев**; доктор хим. наук, проф., чл.-корр. НАН РК **А.Б. Башов**; доктор хим. наук, проф., чл.-корр. НАН РК **М.М. Буркитбаев**; доктор хим. наук, проф., чл.-корр. НАН РК **У.Ж. Джусипбеков**; доктор хим. наук, проф., чл.-корр. НАН РК **Х.И. Итжанова**; доктор хим. наук, проф., чл.-корр. НАН РК **М.З. Мулдахметов**; доктор техн. наук, проф., чл.-корр. НАН РК **Ж.У. Мырхалыков**; доктор мед. наук, проф., чл.-корр. НАН РК **К.Д. Рахимов**; доктор хим. наук, проф., чл.-корр. НАН РК **М.И. Сатаев**; доктор хим. наук, проф., чл.-корр. НАН РК **Л.Т. Ташимов**; доктор хим. наук, проф. **З.А. Мансуров**; доктор техн. наук, проф. **М.К. Наурызбаев**

Редакционный совет:

академик НАН Республики Беларусь **В.Е. Агабеков** (Беларусь); академик НАН Украины **С.В. Волков** (Украина); академик НАН Кыргызской Республики **Ш.Ж. Жоробекова** (Кыргызстан); академик НАН Республики Армения **А.А. Манташян** (Армения); академик НАН Республики Молдова **К. Туртэ** (Молдова); академик НАН Азербайджанской Республики **В. Фарзалиев** (Азербайджан); академик НАН Республики Таджикистан **Д.Х. Халиков** (Таджикистан); доктор хим. наук, проф. **В.Н. Нараев** (Россия); доктор философии, профессор **Полина Прокопович** (Великобритания); доктор хим. наук, профессор **Марек Сикорски** (Польша)

«Известия НАН РК. Серия химии и технологии». ISSN 2224-5286

Собственник: Республиканское общественное объединение «Национальная академия наук Республики Казахстан» (г. Алматы)

Свидетельство о постановке на учет периодического печатного издания в Комитете информации и архивов Министерства культуры и информации Республики Казахстан №10893-Ж, выданное 30.04.2010 г.

Периодичность: 6 раз в год

Тираж: 300 экземпляров

Адрес редакции: 050010, г. Алматы, ул. Шевченко, 28, ком. 219, 220, тел. 272-13-19, 272-13-18,
<http://наука-нанрк.kz / chemistry-technology.kz>

© Национальная академия наук Республики Казахстан, 2015

Адрес редакции: 050100, г. Алматы, ул. Кунаева, 142,
Институт органического катализа и электрохимии им. Д. В. Сокольского,
каб. 310, тел. 291-62-80, факс 291-57-22, e-mail: orgcat@nursat.kz

Адрес типографии: ИП «Аруна», г. Алматы, ул. Муратбаева, 75

Editor in chief

M. Zh. Zhurinov,
academician of NAS RK

Editorial board:

S.M. Adekenov, dr. chem. sc., prof., academician of NAS RK; **A.M. Gazaliev**, dr. chem. sc., prof., academician of NAS RK; **Ye.Ye. Yergozhin**, dr. chem. sc., prof., academician of NAS RK (deputy editor); **K.D. Praliyev**, dr. chem. sc., prof., academician of NAS RK; **A.B. Bayeshov**, dr. chem. sc., prof., corr. member of NAS RK; **M.M. Burkibayev**, dr. chem. sc., prof., corr. member of NAS RK; **U.Zh. Zhusipbekov**, dr. chem. sc., prof., corr. member of NAS RK; **Kh.I. Itzhanova**, dr. chem. sc., prof., corr. member of NAS RK; **M.Z. Muldakhmetov**, dr. eng. sc., prof., corr. member of NAS RK; **Zh.U. Myrkhalykov**, dr. eng. sc., prof., corr. member of NAS RK; **K.D. Rakhimov**, dr. med. sc., prof., corr. member of NAS RK; **M.I. Satayev**, dr. chem. sc., prof., corr. member of NAS RK; **L.T. Tashimov**, dr. chem. sc., prof., corr. member of NAS RK; **Z.A. Mansurov**, dr. chem. sc., prof.; **M.K. Nauryzbayev**, dr. eng. sc., prof.

Editorial staff:

V.Ye. Agabekov, NAS Belarus academician (Belarus); **S.V. Volkov**, NAS Ukraine academician (Ukraine); **Sh.Zh. Zhorobekov**, NAS Kyrgyzstan academician (Kyrgyzstan); **A.A. Mantashyan**, NAS Armenia academician (Armenia); **K. Turte**, NAS Moldova academician (Moldova); **V. Farzaliyev**, NAS Azerbaijan academician (Azerbaijan); **D.Kh. Khalikov**, NAS Tajikistan academician (Tajikistan); **V.N. Narayev**, dr. chem. sc., prof. (Russia); **Pauline Prokopovich**, dr. phylos., prof. (UK); **Marek Sikorski**, dr. chem. sc., prof. (Poland)

News of the National Academy of Sciences of the Republic of Kazakhstan. Series of chemistry and technology.
ISSN 2224-526X

Owner: RPA "National Academy of Sciences of the Republic of Kazakhstan" (Almaty)

The certificate of registration of a periodic printed publication in the Committee of Information and Archives of the Ministry of Culture and Information of the Republic of Kazakhstan N 10893-Ж, issued 30.04.2010

Periodicity: 6 times a year

Circulation: 300 copies

Editorial address: 28, Shevchenko str., of. 219, 220, Almaty, 050010, tel. 272-13-19, 272-13-18,
<http://nauka-nanrk.kz/chemistry-technology.kz>

© National Academy of Sciences of the Republic of Kazakhstan, 2015

Editorial address: Institute of Organic Catalysis and Electrochemistry named after D. V. Sokolsky
142, Kunayev str., of. 310, Almaty, 050100, tel. 291-62-80, fax 291-57-22,
e-mail: orgcat@nursat.kz

Address of printing house: ST "Aruna", 75, Muratbayev str, Almaty

NEWS

OF THE NATIONAL ACADEMY OF SCIENCES OF THE REPUBLIC OF KAZAKHSTAN

SERIES CHEMISTRY AND TECHNOLOGY

ISSN 2224-5286

Volume 1, Number 409 (2015), 65 – 71

**RESEARCH ON INFLUENCE OF SOME ORGANIC COMPOUNDS
(COANP, NPP, PNP) ON THE BEHAVIOR OF POLYMERS BASED
ON POLYIMIDES AND FULLERENE MOLECULES****M. Ye. Agelmenev, Z. M. Muldakhmetov, S. M. Bratukhin,
V. V. Polikarpov, M. M. Bukenov, G. S. Bektasova**

Institute of Organic Synthesis and Coal Chemistry, Karaganda, Kazakhstan.

E-mail: maxut@nursat.kz

Abstract. The paper presents the results of the computer modeling of the behavior of polymers based on polyimides, C60 fullerene molecule and organic molecules. It was found that the alloying of the polymer - fullerene molecule system with the organic molecules leads to the breakdown of polymer chains, as well as to their convergence. This allows to allocate donor-acceptor pairs in the space.

УДК 532.783:541.1:539.21:535.37

**ИССЛЕДОВАНИЯ ВЛИЯНИЯ НЕКОТОРЫХ ОРГАНИЧЕСКИХ
СОЕДИНЕНИЙ (COANP, NPP, PNP) НА ПОВЕДЕНИЕ ПОЛИМЕРОВ
НА ОСНОВЕ ПОЛИИМИДОВ И МОЛЕКУЛ ФУЛЛЕРЕНОВ****М. Е. Агельменев, З. М. Мулдахметов, С. М. Братухин,
В. В. Поликарпов, М. М. Букенов, Г. С. Бектасова**

Институт органического синтеза и углехимии, Караганда, Казахстан

Аннотация. В работе представлены результаты компьютерного моделирования поведения полимеров на основе полиимидов, молекулы фуллеренов C60 и молекул органических соединений. Установлено, что легирование системы полимер – молекулы фуллерена органическими молекулами приводит как к процессам разрыва полимерных цепей, так и к их сближению. Это позволяет распределять донорно-акцепторные пары в пространстве.

При улучшении времен переключения нематических жидкокристаллических (ЖК) –ячеек, при создании донорно-акцепторной пары полимер – фуллерен [1–10] производится добавление органических добавок. Обладая повышенным дипольным моментом [9], новый комплекс приводит к увеличению поляризуемости системы, что вызывает более эффективное ее управление при приложении внешнего электрического или светового воздействия. В [10] показано, что комплекс органический донор – фуллерен выступает как активатор процесса самоорганизации ЖК системы, обуславливая более упорядоченную укладку молекул ЖК. При этом установлено на 2 порядка сокращение времени переключения структур.

Наличие полимерных цепей усиливают упорядоченность ЖК, в то же время молекулы фуллеренов ее ослабляют [11]. В этом смысле непонятна роль добавок в виде органических соединений, известных как COANP, NPP, PNP, при создании такой системы. Исследования поведения компонент такой системы при воздействии температуры в присутствии электрического поля представляет собой научный интерес.

Как показали наши квантово-химические исследования (GAMESS Job: Compute Properties RHF/3-21G: Basis Set – 3-21G, Method – HF, Wave Function – R) этих соединений, они обладают высокими значениями дипольных моментов (рисунок 1).

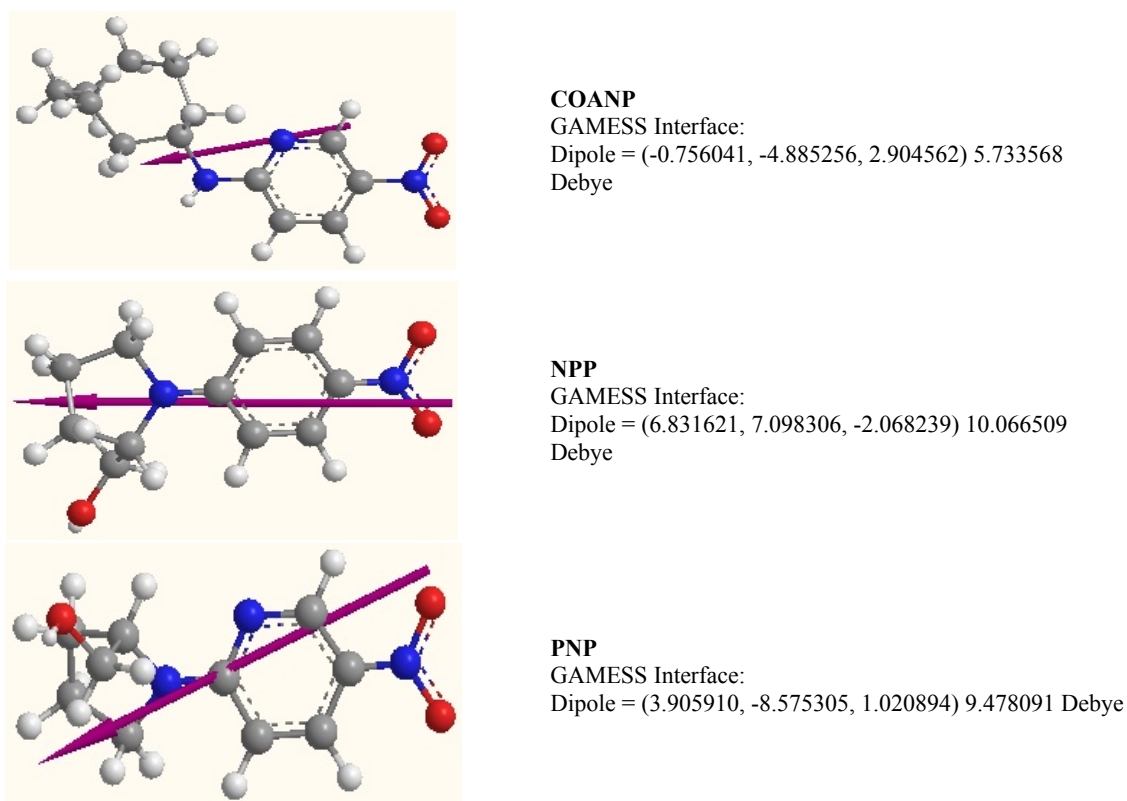


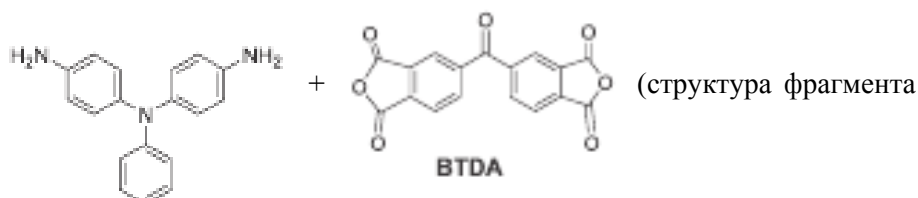
Рисунок 1 – Название, метод расчета, дипольный момент, структура и направление дипольного момента исследуемых молекул COANP, NPP, PNP

С целью выяснения влияния этих органических соединений на образование вышеуказанных добавок были проведены соответствующие исследования. В этой статье представлены результаты работы по созданию и компьютерному моделированию компонент системы, содержащей молекулы фуллеренов C₆₀, полимеров на основе полиимидов, содержащих *нитро*-группу и по одной-две молекуле органических соединений COANP, NPP, PNP (структура соединений оптимизирована методом MMFF94 из пакета программ ChemOffice 12).

Осуществлен подбор оптимальных параметров моделирования (давление, время отжига и т.д.). Созданы входные файлы, определяющие геометрию и силовое поле этих соединений.

Исходная система молекул составляла 4 цепи полиимидов, каждая из которых состояла из 10

представленных звеньев:



оптимизирована методом MMFF94 из пакета программ ChemOffice 12), 4 молекулы фуллеренов C₆₀, которые располагались по 2 молекулы между 1 и 2 цепью и между 3 и 4 цепями, 1 и 2 молекулы органических соединений (COANP, NPP, PNP) между 2 и 3 цепью полиимидов. Были запланированы 8 экспериментов (таблица 1).

Расположение компонент системы обусловлено дальнейшим моделированием с участием молекул ЖК, где кластеры составляют прямоугольные параллелепипеды размерами – 13x13x7 (ФЭК) и 14x14x7 (ФЭФ).

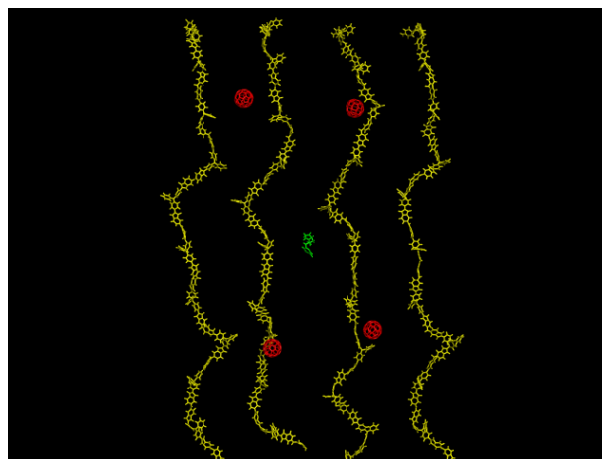
Таблица 1 – Нумерация проводимых экспериментов
в системе цепи полиимидов – молекулы фуллеренов – органические добавки

№	Описание эксперимента
1	4 цепи полиимидов, 4 молекулы C60, 1 молекула COANP в центре системы
2	4 цепи полиимидов, 4 молекулы C60, 1 молекула NPP в центре системы
3	4 цепи полиимидов, 4 молекулы C60, 1 молекула PNP в центре системы
4	4 цепи полиимидов, 4 молекулы C60, 2 молекулы COANP в центре системы
5	4 цепи полиимидов, 4 молекулы C60, 2 молекулы NPP в центре системы
6	4 цепи полиимидов, 4 молекулы C60, 2 молекулы PNP в центре системы
7	4 цепи полиимидов, 4 молекулы C60, по 1 молекуле COANP и PNP в центре системы
8	4 цепи полиимидов, 4 молекулы C60, по 1 молекуле COANP и NPP в центре системы

Расположение цепей относительно ЖК рядов 1) 3x1x1, 2) 6x1x1, 3) 9x1x1, 4) 12x1x1. Цепь полимера разворачивалась относительно OY на 180°. Расстояния между цепями – $x=2,4$ нм, между цепями и молекулами $z=1$ нм (сверху). Расположение фуллеренов C60: 1) 4x4x2, 2) 4x9x2, 3) 11x4x2, 4) 11x9x2. Расположение 2 молекул (COANP, NPP, PNP): 1) 7x7x2 (в случае одной молекулы), 2) 7x8x2.

Для проведения моделирования поведения этих соединений был использован метод молекулярной динамики на основе программы GROMACS [12] версии 3.3.1 в приближении жидкого агрегатного состояния [12-15]. При моделировании использован NPT ансамбль. Радиусы отсечки дисперсионного и кулоновского взаимодействия составляли 2,0 нм. Были проведены последовательные отжиги в режиме нагрева. Время отжига при одной температуре составляло 10 пс, но при этом кластер располагался в одной ячейке, чем было реализовано жидкое агрегатное состояние системы, а значение напряженности электрического поля составляло 1×10^7 В/м и направлено перпендикулярно OY и OZ. Направление полимерных цепей совпадало с осью OY. Структура исходной системы представлена на рисунке 2.

Рисунок 2 – Вид исходной структуры исследуемой системы после отжига при $T=325$ K



Анализ полученных результатов показал небольшие различия в изменении компонент по отношению друг к другу при изменении направления электрического поля. Поэтому в дальнейшем представлены результаты исследований при направлении электрического поля, перпендикулярного плоскости исходного кластера (OZ). Цепи обозначим m_1, m_2, m_3, m_4 в последовательности, указанной на рисунке 2. Расстояния между ними измерялись между их центрами тяжести.

Результаты исследований представлены на рисунках 3-12.

Как видно на рисунках 3-5, при расположении 1 молекулы органической добавки расстояние между цепями 2 и 3 особенно заметно изменилось. Так, в области мезофазы ($T=340$ K) оно составило 3,382 нм (COANP), 4,505 нм (NPP), 2,648 нм (PNP). Только в случае молекулы NPP расстояние между этими цепями возросло с ростом температуры.

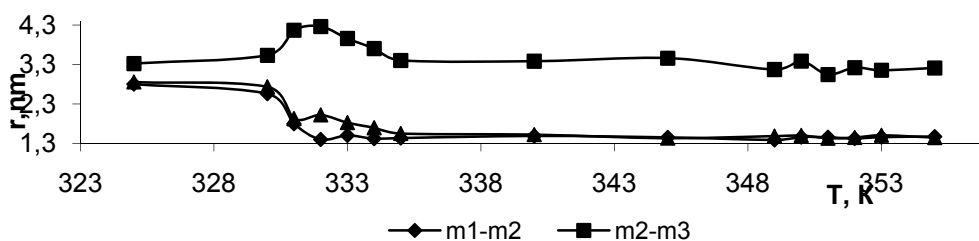


Рисунок 3 – Температурная зависимость расстояния между цепями в случае эксперимента 1 – COANP

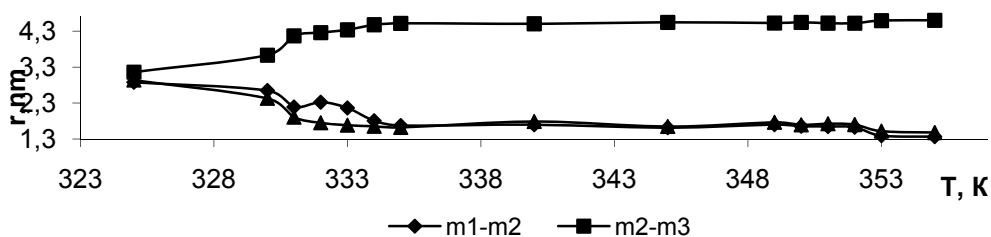


Рисунок 4 – Температурная зависимость расстояния между цепями в случае эксперимента 2 – NPP

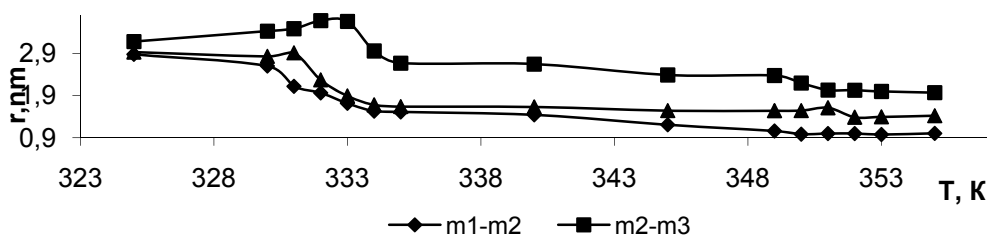


Рисунок 5 – Температурная зависимость расстояния между цепями в случае эксперимента 3 – PNP

Увеличение количества молекул органических добавок до 2-х (рисунки 6-8) приводит к наибольшему расстоянию в случае молекулы COANP (5,211 нм), понижает расстояние для молекулы NPP (2,148нм) и повышает для PNP (3,688нм). Столь сложное влияние, по-видимому, обусловлено значительными дипольными моментами (рисунок 1). Это может приводить как сильному притяжению, так и сильному отталкиванию этих молекул, Полимерные цепи оказываются «увлеченными» такими процессами. Изменение расстояния будет определять эффективность работы донорно-акцепторной пары. Поэтому правильный подбор состава такой системы должен учитывать концентрацию этих органических добавок. Их избыток будет уменьшать упорядоченность ЖК из-за возмущений, вносимых диполь-дипольным взаимодействием.

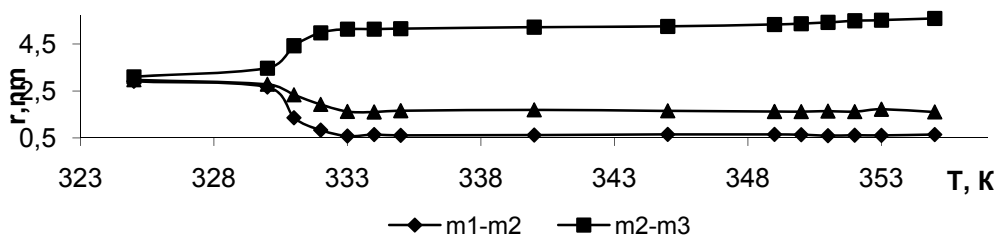


Рисунок 6 – Температурная зависимость расстояния между цепями в случае эксперимента 4 – COANP

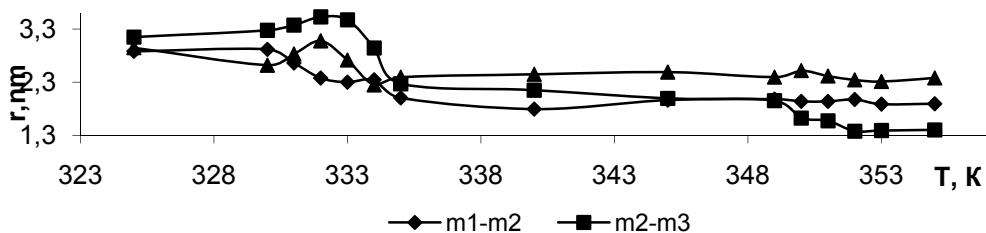


Рисунок 7 – Температурная зависимость расстояния между цепями в случае эксперимента 5 – NPP

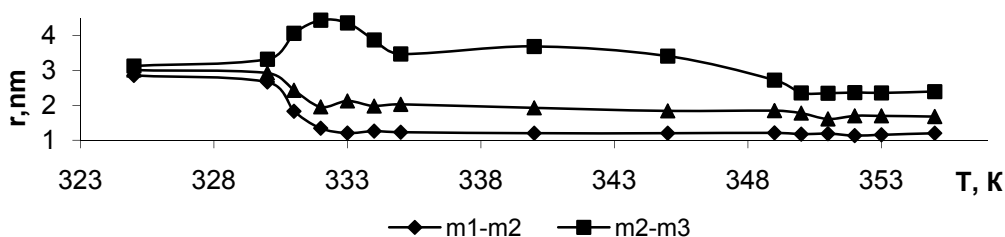


Рисунок 8 – Температурная зависимость расстояния между цепями в случае эксперимента 6 – PNP

Правомерность таких рассуждений подтверждается изменением между цепями при наличии по одной молекуле органических добавок разного вида (рисунки 9-10). Наиболее сильно уменьшается расстояние между цепями в случае COANP+PNP.

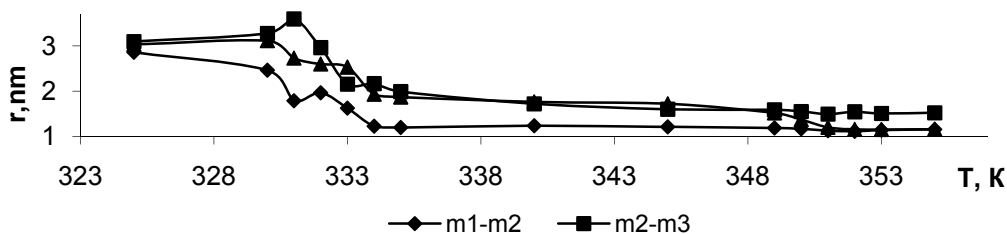


Рисунок 9 – Температурная зависимость расстояния между цепями в случае эксперимента 7 – COANP+PNP

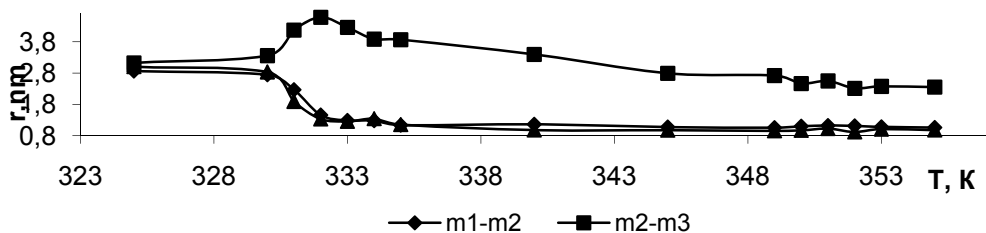


Рисунок 10 – Температурная зависимость расстояния между цепями в случае эксперимента 8 – COANP+NPP

Снимки кластеров (рисунки 11, 12) демонстрируют влияние различных органических добавок. Необходимо отметить, что в каждой части (рисунок 11) имеются молекулы фуллерена.

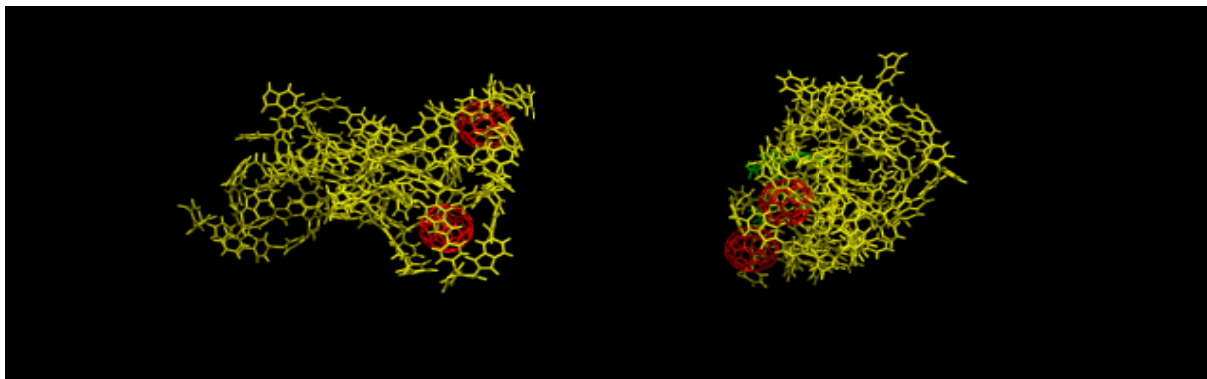


Рисунок 11 – Снимок системы в проекции XOY в случае эксперимента 4 – COANP при T=340K

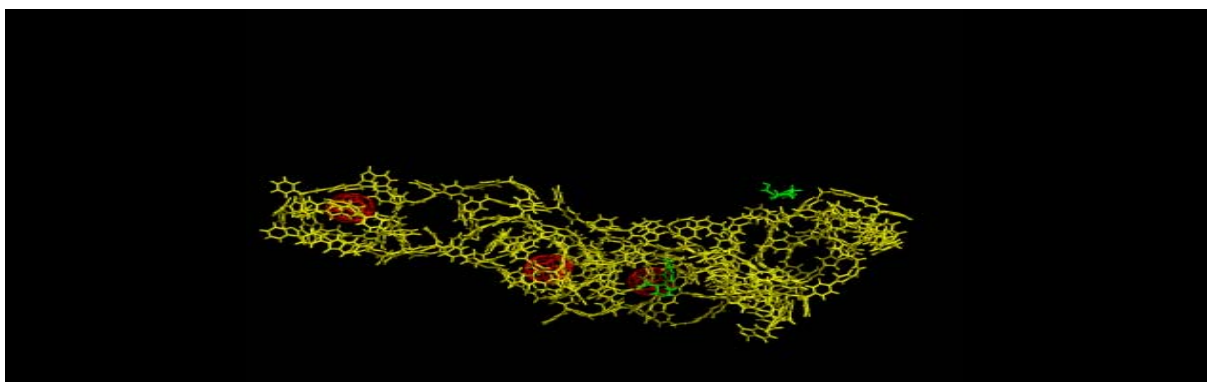


Рисунок 12 – Снимок системы в проекции XOY в случае эксперимента 5 – NPP при T=340K

Таким образом, на основании проведенных исследований установлено, что легирование системы полимер – молекулы фуллерена органическими молекулами приводит как к процессам разрыва полимерных цепей, так и к их сближению. Это позволяет распределять донорно-акцепторные пары в пространстве.

ЛИТЕРАТУРА

- [1] Hosoda K., Tada R., Ishikawa M., Yoshino K. Effect of C60 doping on electrical and optical properties of poly[(disilanyl)oligophenylenes] // *Jpn. J. Appl. Phys.* – 1997. – Pt 2, Vol. 36, N 3B. – P. L372-L375.
- [2] Itaya A., Sizzuki I., Tsuboi Y., Miyasaka H. Photoinduced electron transfer processes of C60-doped poly(N-vinylcarbazole) films as revealed by picosecond laser photolysis // *J. Phys. Chem. B.* – 1997. – Vol. 101, N 26. – P. 5118-5123.
- [3] Kamanina N.V. Reverse saturable absorption in fullerene-containing polyimides. Applicability of the Forster model // *Opt. Commun.* – 1999. – Vol. 162, N 4-6. – P. 228-232.
- [4] Kamanina N., Barrientos A., Leyderman A. et al. Effect of fullerene doping on the absorption edge shift in COANP // *Molecular Materials.* – 2000. – Vol. 13, N 1-4. – P. 275-280.
- [5] Lu Z., Goh S.H., Lee S.Y. et al. Synthesis, characterization and nonlinear optical properties of copolymers of benzylaminofullerene with methyl methacrylate or ethyl methacrylate // *Polymer.* – 1999. – Vol. 40. – P. 2863-2867.
- [6] Kamanina N.V., Bagrov I.V., Belousova I.M. et al. Fullerene-doped π -conjugated organic systems under infrared laser irradiation // *Opt. Commun.* – 2001. – Vol. 194, N 4-6. – P. 367-372.
- [7] Каманина Н.В. Светоиндуцированное изменение показателя преломления в системе полиимид-фуллерен // *Оптика и спектроскопия.* – 2001. – Т. 90, № 6. – С. 960-964.
- [8] Каманина Н.В., Сизов В.Н., Стаселько Д.И. Запись тонких фазовых голограмм в полимер-диспергированных жидкокристаллических композитах на основе фуллереносодержащих π -сопряженных органических систем // *Оптика и спектроскопия.* – 2001. – Т. 90, № 1. – С. 5-7.
- [9] Ruani G., Biscarini M., Cavallini M. et al. Optical limiting in the near infrared: a new approach // *Abstract booklet of 2nd Intern. Symp. on Optical Power Limiting, Venice (Italy), July 2-5, 2000.* – P. 69.
- [10] Каманина Н.В. Фуллереносодержащие диспергированные нематические жидкокристаллические структуры: динамические характеристики и процессы самоорганизации // *Успехи физ.наук.* – 2005. – Т. 175, № 4. – С. 445-454.
- [11] Agelmenev M.A., Muldakhmetov Z.M., Bratukhin S.M., Polikarpov V.V. The influence of polyimides on the nematic liquid crystals behaviour // *5th Intern. Scien.Conf. "Theoretical and experimental chemistry", academician E. A. Buketov Karaganda State University, September 24-27, 2014, Karaganda.* P. 24.

- [12] Van der Spoel D., Lindahl E., Hess B., van Buuren A.R., Apol E., Meulenhoff P.J., Tieleman D.P., Sijbers A.L.T.M., Feenstra K.A., van Drunen R. and Berendsen H.J.C. GROMACS User Manual version 3.3.1, www.GROMACS.org
- [13] Agelmenev M.E., Muldakhmetov Z.M., Bratukhin S.M., Pak V.G., Polikarpov V.V., Yakovleva O.A. The dynamics of some nematic liquid crystals // Mol. Cryst. Liq. Cryst. – 2008. – Vol. 494. – P. 339-352.
- [14] Агельменев М.Е., Братухин С.М., Мулдахметов З.М., Поликарпов В.В. Моделирование мезогенной системы в жидком агрегатном состоянии // Ж. физ. хим. – 2010. – Т. 84, № 7. – С. 1280-1284.
- [15] Agelmenev M.E. The modeling with free boundary // Mol. Cryst. Liq. Cryst. – 2011. – Vol. 545, N 1. – P. 190-203.

REFERENCES

- [1] Hosoda K., Tada R., Ishikawa M., Yoshino K. Effect of C60 doping on electrical and optical properties of poly[(disilanyl)oligophenylenes]. Jpn. J. Appl. Phys. 1997. Pt 2, Vol. 36, N 3B. P. L372-L375.
- [2] Itaya A., Sizzuki I., Tsuboi Y., Miyasaaka H. Photoinduced electron transfer processes of C60-doped poly(*N*-vinyl-carbazole) films as revealed by picosecond laser photolysis. J. Phys. Chem. B. 1997. Vol. 101, N 26. P. 5118-5123.
- [3] Kamanina N.V. Reverse saturable absorption in fullerene-containing polyimides. Applicability of the Forster model. Opt. Commun. 1999. Vol. 162, N 4-6. P. 228-232.
- [4] Kamanina N., Barrientos A., Leyderman A. et al. Effect of fullerene doping on the absorption edge shift in COANP. Molecular Materials. 2000. Vol. 13, N 1-4. P. 275-280.
- [5] Lu Z., Goh S.H., Lee S.Y. et al. Synthesis, characterization and nonlinear optical properties of copolymers of benzylaminofullerene with methyl methacrylate or ethyl methacrylate. Polymer. 1999. Vol. 40. P. 2863-2867.
- [6] Kamanina N.V., Bagrov I.V., Belousova I.M. et al. Fullerene-doped π -conjugated organic systems under infrared laser irradiation. Opt. Commun. 2001. Vol. 194, N 4-6. P. 367-372.
- [7] Kamanina N.V. Light-induced refractive index change in the polyimide-fullerene. Optics and Spectroscopy. 2001. Vol. 90, N 6. P. 960-964. (in Russ.).
- [8] Kamanina N.V., Sizov V.N., Staselko D.I. Record fine phase holograms in the polymer-dispersed liquid crystal composites based on fullerene π -conjugated organic systems. Optics and Spectroscopy. 2001. Vol. 90, N 1. P. 5-7. (in Russ.).
- [9] Ruani G., Biscarini M., Cavallini M. et al. Optical limiting in the near infrared: a new approach. Abstract booklet of 2nd Intern. Symp. on Optical Power Limiting, Venice (Italy), July 2-5, 2000. P. 69.
- [10] Kamanina N.V. Fullerene-dispersed nematic liquid crystal structures: dynamic characteristics and self-organization processes. Advances of phys.sciences. 2005. Vol. 175, N 4. P. 445-454. (in Russ.).
- [11] Agelmenev M.A., Muldakhmetov Z.M., Bratukhin S.M., Polikarpov V.V. The influence of polyimides on the nematic liquid crystals behaviour. 5th Intern. Scien.Conf. "Theoretical and experimental chemistry", academician Ye.A. Buketov Karaganda State University, September 24-27, 2014, Karaganda. P. 24.
- [12] Van der Spoel D., Lindahl E., Hess B., van Buuren AR, Apol E., Meulenhoff PJ, Tieleman DP, Sijbers ALTM, Feenstra KA, van Drunen R. and Berendsen HJC GROMACS User Manual version 3.3.1, www.GROMACS.org
- [13] Agelmenev M.Ye., Muldakhmetov Z.M., Bratukhin S.M., Pak V.G., Polikarpov V.V., Yakovleva O.A. The dynamics of some nematic liquid crystals. Mol. Cryst. Liq. Cryst. 2008. Vol. 494. P. 339-352.
- [14] Agelmenev M.Ye., Bratukhin S.M., Muldakhmetov Z.M., Polikarpov V.V. Modeling mesogenic system in the liquid state. Jour. Phys. chem. 2010. Vol. 84, N 7. P. 1280-1284. (in Russ.).
- [15] Agelmenev M.Ye. The modeling with free boundary. Mol. Cryst. Liq. Cryst. 2011. Vol. 545, N 1. P. 190-203.

ФУЛЛЕРЕН МОЛЕКУЛАЛАР ЖӘНЕ ПОЛИИМИД НЕГІЗІНДЕГІ ПОЛИМЕРЛЕРДІҢ СИПАТТЫЛЫҒЫНА КЕЙБІР ОРГАНИКАЛЫҚ ҚОСПАЛАРДЫҢ (СОАНP NPP PNP) ӘСЕРЛЕРІНІҢ ЗЕРТТЕУЛЕРІ

**М. Е. Агельменев, С. М. Братухин, З. М. Молдахметов,
В. В. Поликарпов, М. М. Букенов, Г. С. Бектасова**

Аннотация. Берілген жұмыста, компьютерлік модельдеу нәтижелері органикалық қоспалар, полиимид негізіндегі полимерлердің, C60 фуллерен молекулалары бар нематикалық сұйық кристалдар қылықтары ұсынылған. Полимер жүйелерін легильдеуі-фуллерен молекуласы органикалық молекуласымен, полимер тізбегінің ажырауы процессіне ғана емес және де жақындау процессіне алып келетіні анықталды. Бұл донорлы акцепторлық жұптардың кеңістіктегі үлестіруіне мүмкіндік береді.

Поступила 05.02.2015г.

Правила оформления статьи для публикации в журнале смотреть на сайте:

[www:nauka-nanrk.kz](http://www.nauka-nanrk.kz)
chemistry-technology.kz

Редакторы: *М. С. Ахметова, Ж. М. Нургожина*
Верстка на компьютере *Д. Н. Калкабековой*

Подписано в печать 16.02.2015.
Формат 60x881/8. Бумага офсетная. Печать – ризограф.
6,0 п.л. Тираж 300. Заказ 1.