

## **Popularnonaukowe streszczenie projektu**

Racjonalne projektowanie materiałów dla fotoniki jest obecnie ukierunkowane na badania supramolekularnych układów, w których oddziaływania niekowalencyjne odgrywają zasadniczą rolę. Zaawansowane metody chemii kwantowej mogą być niezwykle pomocne w zrozumieniu roli oddziaływań międzycząsteczkowych w nieliniowej optycznej odpowiedzi agregatów molekularnych. Analizę wpływu oddziaływań na nieliniowe właściwości optyczne molekuł można przeprowadzić w oparciu o wielkości indukowane oddziaływaniem (nadmiarowe). W literaturze przedmiotu sporo uwagi poświęcono analizie wkładów elektronowych do wielkości indukowanych oddziaływaniem. Ponadto, w ostatnich dwóch dekadach zaproponowano metody podziału wkładów elektronowych do wielkości nadmiarowych na gruncie teorii oddziaływań międzycząsteczkowych, co pozwala na zrozumienie ich natury fizycznej. Należy jednak podkreślić, że stosunkowo niewiele uwagi poświęcono wkładom oscylacyjnym do indukowanych oddziaływaniami nieliniowych właściwości optycznych. Jest to bez wątpienia związane ze znaczną złożonością formalną i numeryczną omawianego zagadnienia. Celem przedłożonego projektu jest uzupełnienie tej luki. W szczególności, po raz pierwszy wykonana zostanie analiza natury fizycznej wkładów oscylacyjnych do nadmiarowych nieliniowych optycznych właściwości kompleksów molekularnych, w oparciu o podział na przyczynki pochodzące od podstawowych typów oddziaływań, tj. elektrostatycznych, wymiennych, indukcyjnych i dyspersyjnych. Badania przeprowadzone będą w oparciu o metody chemii kwantowej dla kompleksów molekularnych z międzycząsteczkowym wiązaniem wodorowym oraz w ułożeniach warstwowych.