

W ostatnich latach symulacje komputerowe stały się popularnym narzędziem badawczym. Wykorzystywane są w wielu dziedzinach nauki od medycyny poprzez ekonomię do inżynierii materiałowej. Aby metody symulacji komputerowych mogły być wykorzystywane z powodzeniem w inżynierii materiałowej do projektowania nowoczesnych, funkcjonalnych materiałów, potrzebne jest opracowanie odpowiednich modeli obliczeniowych oraz metodologii postępowania. Wymagane jest aby prace symulacyjne odzwierciedlały zjawiska fizyczne zachodzące w realnym świecie, a otrzymane wyniki były porównywalne z danymi eksperymentalnymi co nie jest łatwe, ponieważ wartości mierzone w doświadczeniu nie są tymi parametrami, które są efektem obliczeń kwantowo-chemicznych na poziomie atomowym. Z drugiej strony symulacje komputerowe pozwalają bez konieczności syntezy materiału przewidzieć jego własności i wyjaśnić dobór komponentów takich, aby ich parametry fizyczne były sprzyjające w poszukiwaniu pożądanych kompozytów.

Celem badań realizowanych w mniejszym projekcie jest opracowanie metodologii postępowania oraz stworzenie modelu obliczeniowego pozwalającego przewidzieć liniowe i nieliniowo-optyczne (NLO) własności materiałów kompozytowych na bazie polimeru i NLO aktywnych molekuł. Takie materiały utwardzonego w postaci cienkiej warstwy mogą być wykorzystane do optycznego zapisu informacji i holografii jak również do budowy elementów elektrooptycznych, przełączników, wyświetlaczy oraz generatorów laserowych. Aby jednak mówić o wykorzystaniu praktycznym tych materiałów konieczne jest ich zbadanie i opisanie mechanizmów zjawisk fizycznych w nich zachodzących.

Użyteczność kompozytowych materiałów polimerowych do zastosowań NLO zależy od polaryzacji molekuł organicznych w matrycy, a co za tym idzie od orientacji chromoforów w przestrzeni. W związku z tym potrzebne jest umieszczenie molekuł w matrycy polimerowej, uporządkowanie struktury metodą *corona poling* oraz utwardzanie kompozytu w postaci cienkiej warstwy. Matryca polimerowa znacznie zmienia własności optyczne chromoforów w porównaniu do własności molekuł izolowanych. Zmiana własności optycznych kompozytu w stosunku do izolowanych komponentów jest bardzo ciekawym zagadnieniem w procesie wytwarzania cienkich warstw o wysokim stopniu wydajności NLO. Prowadzone badania eksperymentalne począwszy od syntezy warstw do zbadania ich własności optycznych takich jak absorpcja UV-vis oraz zjawiska generacji drugiej i trzeciej harmonicznej światła dają opis własności elektronowych i optycznych struktur kompozytowych jako materiału objętościowego. Symulacje komputerowe prowadzone metodami dynamiki molekularnej oraz obliczeń kwantowo-chemicznych opisują procesy fizyczne zachodzące w materiale na poziomie atomowym. Stworzenie modelu obliczeniowego pozwalającego poprzez symulacje polaryzowalności i hiperpolaryzowalności określić liniowe i nieliniowe podatności optyczne pozwoli wykorzystać metodologię obliczeń kwantowo-chemicznych i molekularno dynamicznych do projektowania nowoczesnych materiałów. W tym celu konieczne jest wymodelowanie struktury molekuły NLO aktywnej w środowisku polimerowym z zachowaniem parametrów cienkowarstwowego ciała stałego, obliczenie mikroskopowych własności optycznych komponentów, zastosowanie metodologii dyskretnego pola lokalnego do obliczenia własności optycznych materiału kompozytowego. Porównanie wartości eksperymentalnych z wynikami obliczeń pozwoli zweryfikować poprawność zastosowanego modelu obliczeniowego i określić wzajemne oddziaływanie komponentów. Weryfikacji będzie podlegał zaproponowany model oddziaływania multipolowego między molekułami kompozytu.

Podsumowując, projekt realizuje badania eksperymentalne i teoretyczne określające wpływ matrycy polimerowej na zmianę liniowych i nieliniowych własności optycznych cienkowarstwowych materiałów kompozytowych typu „gość-gospodarz”. Jako matryce użyte są polimery PMMA, PVK oraz PC natomiast aktywnymi molekułami są chromofory typu *push-pull* posiadające grupy elektrono-donorową i akceptorową. Badania eksperymentalne posłużą do zweryfikowania poprawności zaproponowanych modeli teoretycznych. Zazwyczaj badania teoretyczne molekuł analizują ich własności optyczne w próżni lub w rozpuszczalniku. Proponowany projekt przedstawia nowoczesne podejście do analizy własności optycznych molekuł NLO aktywnych w cienkiej warstwie polimerowej.