

## Praca Doktorska

### The influence of environment on the electronic and optical properties of thin films composite materials

Lucia Nechalova

Organiczne materiały nieliniowoptyczne (NLO) odgrywają kluczową rolę we współczesnych elementach optoelektronicznych. Większość z nich to chromofory oparte na aromatycznych układach  $\pi$ -elektronowych niesymetrycznie zakończonych donorowymi i akceptorowymi grupami elektronowymi mającymi wpływ na polaryzację materiału. NLO aktywne chromofory są zazwyczaj umieszczone w matrycach polimerowych, tworząc cienkowarstwowe materiały kompozytowe typu *gość-gospodarz*. Aby mówić o praktycznym zastosowaniu tych materiałów, konieczne jest zbadanie właściwości kompozytów oraz opisanie mechanizmów zjawisk fizycznych zachodzących zarówno w poszczególnych komponentach, jak i w kompozycie jako całości. W tym przypadku pomocne są symulacje komputerowe.

Celem niniejszej pracy było opracowanie teoretycznego modelu obliczeniowego oraz metodyki postępowania w zakresie przewidywania makroskopowych właściwości optycznych cienkowarstwowych materiałów kompozytowych. Do modelowania struktur kompozytów wykorzystano technikę dynamiki molekularnej, a obliczenia kwantowo-chemiczne posłużyły do przewidywania właściwości optycznych chromoforów w środowisku polimerowym. Właściwości optyczne obliczono stosując model dyskretnego pola lokalnego w podejściu hierarchicznym. Dane uzyskane z obliczeń porównano z wynikami eksperymentalnymi zaczerpniętymi z badań sygnałów SHG i THG.

Jako modelowe materiały typu *gość-gospodarz* wybrano kompozyty na bazie poli(metakrylanu metylu) (PMMA) i poli(winylo karbazolu) (PVK). W matrycach polimerowych osadzono dwie grupy chromoforów NLO. Jedną grupę stanowiły cztery różne pochodne tetratriafulwalenu (TTF) z przyłączonymi azynami, a drugą grupę - trzy pochodne benzonitrylu. Omówiono wyniki symulacji dynamiki molekularnej materiałów kompozytowych chromofor/PMMA oraz chromofor/PVK, a także właściwości strukturalne, elektroniczne i optyczne chromoforów w próżni i w matrycy polimerowej. Uzyskane dane obliczeniowe porównano z wynikami eksperymentalnymi, co stanowiło test poprawności wdrożonego modelu obliczeniowego. Wyjaśniono wpływ matryc polimerowych na wzmocnienie właściwości NLO pochodnych benzonitrylu w matrycy PVK oraz neutralność

matrycy PMMA w stosunku do badanych chromoforów. Właściwości optyczne badanych kompozytów wyjaśniono na podstawie przestrzennego rozkładu chromoforów w matrycy polimerowej.

Lucia Nacheła

Częstochowa, dnia 27.04.2022