

FAKTORIĀLS PĒTĪJUMS PAR OTRĀS HIPERPOLARIZĒJAMĪBAS APRĒĶINIEM

Igors Mihailovs¹, Mārtiņš Rutkis¹, Arturs Bundulis¹, Dmitrijs Bočarovs¹

¹*Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūts*

Pēdējos gadus novēro ievērojamu zinātnisko interesi par trešās kārtas nelineāriem optiskiem materiāliem fotonikas lietojumiem. Vieni no tiem ir materiāli, kas demonstrē izteiktu elektronisko optisko Kerra efektu, un to vidū lielu uzmanību ir piesaistījuši organiskie materiāli, jo tiem ir liels pārveidošanas un pielāgošanas potenciāls. Tāpēc uzticama metodoloģija otrās hiperpolarizācijas aprēķiniem ir aktuāls temats efektīvu fotonisko organisko materiālu meklējumos. Diemžēl vispārpieņemta skaitļošanas metodika joprojām nav izstrādāta. Hamiltoniānis un bāzes funkciju kopa, šķīdinātāja iekļaušana modelī, izmantotā ģeometrija – visi šie (un vēl citi) ir parametri, kas jāņem vērā. Šis visaptverošais pētījums, kas ietver vairākus faktoru eksperimentus, ir mēģinājums palīdzēt labāk izprast dažādu aprēķina faktoru plusus un mīnus. Atsauces vienādojumu pieejas relatīvi labāka veiktspēja salīdzinājumā ar CPKS+FF, neparasti novērojumi Hamiltoniāņu relatīvā veiktspējā un mūsdienu šķīdināšanas modeļu vājums ir daži no šī pētījuma rezultātiem.

CALCULATION OF SECOND HYPERPOLARIZABILITIES: A FACTORIAL-DESIGNED STUDY

Igors Mihailovs¹, Mārtiņš Rutkis¹, Arturs Bundulis¹, Dmitrijs Bočarovs¹

¹*Institute of Solid State Physics, University of Latvia*

There has been considerable scientific interest in third-order nonlinear optical materials for photonic applications. Particularly, materials demonstrating pronounced electronic optical Kerr effect are one of the main building blocks. Among them, organic materials have attracted great attention due to their great potential for modification and tailoring. Therefore, reliable calculation of the second hyperpolarizabilities is a hot topic in the search for efficient photonic organic materials. Unfortunately, the computational methodology remains a challenge even nowadays. The Hamiltonian and the basis set, the solvation modeling, the geometry used – all these (and more) are parameters to consider. This comprehensive study, following a factorial design, is an attempt to contribute to further understanding the pros and cons of different factors of calculation. The prevalence of the response-equations approach over the CPKS+FF one, unexpected findings about the performance of different Hamiltonians, and the weakness of contemporary solvation models are among the findings of this study.

The financial support of Latvian Science Council project is greatly acknowledged.