

Oddziaływanie światła z materią jest jednym z fundamentalnych zjawisk, które, między innymi, odpowiada za możliwość dostrzegania otaczającego nas świata. Jest to, jednak, zjawisko o małej wydajności. Wydajność ta może jednak ulec zwiększeniu poprzez zastosowanie odpowiednio przygotowanych struktur, tak zwanych rezonansowych wnęk optycznych, które umożliwiają silną koncentrację światła w niewielkich objętościach. W tych obszarach siła oddziaływania światła z materią wzrasta znacząco, co przejawia się między innymi wzmocnioną emisją spontaniczną. Poprzez umiejętne skonstruowanie wnęki rezonansowej wydajność oddziaływania może być zwiększona do takich wartości, że następuje modyfikacja oryginalnych modów, które przestają być rozróżnialne pod względem swoich początkowych cech.

Powyższe zjawisko wynika z faktu, iż oryginalne mody (wnęki rezonansowej i np. przejścia elektronowego w materii) wymieniają się energią ze stałą szybkości dużo większą, niż cechujące je ich własne stałe zaniku. W tym silnie sprzężonym stanie nowe mody, zwane polarytonowymi, wykazują cechy zarówno światła i materii. Istnienie tych stanów polarytonowych umożliwiło obserwację oddziaływania kondensację Bosego-Einsteina takich polarytonów oraz blokadę fotonową (ang. photon blockade). Silne sprzężenie przyciąga uwagę także z powodu potencjalnych modyfikacji własności materii poprzez umieszczenie jej w obrębie stosownej wnęki rezonansowej – jednym z przykładów byłaby modyfikacja reakcji chemicznych. Zrozumienie oraz przewidywanie powyższych oraz innych zjawisk wymaga stosownych opisów teoretycznych oraz modeli numerycznych. Obecnie stosuje się zarówno proste klasyczne jak i zaawansowane kwantowo-mechaniczne opisy, jednakże na ogół materia jest traktowana z pewnymi przybliżeniami, które pomijają złożoną strukturę elektronową np. oddziałujących molekuł.

Niniejszy projekt ma na celu, z jednej strony, zniwelowanie tych ograniczeń i zbadać zjawisko silnego sprzężenia pomiędzy przejściami elektronowymi w molekułach bądź ekscytonami w półprzewodnikach z plazmonicznymi wnękami rezonansowymi przy użyciu metod uwzględniających elektroniczną strukturę materii. Stosując metody teorii funkcjonału gęstości zbadana zostanie możliwość osiągnięcia silnego oraz ultra-silnego sprzężenia z jedną molekułą w powyższych układach i udowodnienie, że struktura energetyczna takiej silnie sprzężonej molekuły jest zmodyfikowana w stopniu istotnie modyfikującym jej własności chemiczne. Powyższe obliczenia będą uzupełniane modelowaniem elektromagnetycznym rozciągniętych, kilkudziesięcionanometrowych struktur zbudowanych z wielowarstwowych dichalkogenków metali przejściowych. Dzięki dużej przenikalności dielektrycznej te dwu-wymiarowe półprzewodniki, które mogą tworzyć wielowarstwy dzięki oddziaływaniom van der Waalsa, są w stanie funkcjonować jak optyczne rezonatory, których mody sprzęgną się z własnymi ekscytonami. Ta cecha pozwala na zaprojektowanie nowych, bazujących na silnym sprzężeniu światło-materia, urządzeń, które mogą umożliwić wydajną manipulację oraz detekcję światła, pozyskiwanie energii słonecznej w układach fotowoltaicznych, a także fotokatalizę dzięki modyfikacji swoich poziomów energetycznych bądź sąsiadujących z tymi układami molekuł. Obliczenia elektromagnetyczne oraz teorii funkcjonału gęstości będą także stosowane łącznie. Niniejsze podejście umożliwi wykorzystanie realistycznych pól elektrycznych w obliczeniach elektronicznych bądź bardzo dokładny opis materii w nanoskali w modelowaniu elektromagnetycznym. Powyższe wyniki będą finalnie służyły do poprawy/modyfikacji modeli analitycznych, które będą stosowane w interpretacji rezultatów.

Podstawowym osiągnięciem projektu będzie nowa wiedza na temat silnego sprzężenia w układach światło-materia. Pierwszym istotnym wynikiem będzie zaproponowanie nowatorskich samo-sprzężonych ekscytonowych wnęk rezonansowych i poznanie ich własności, które umożliwią w przyszłości budowę przestrajalnych urządzeń do pozyskiwania energii słonecznej, manipulacji światłem, bądź jego detekcją. Drugim ważnym osiągnięciem będzie poznanie jak silne sprzężenie z plazmonicznymi rezonatorami wpływa na strukturę poziomów energetycznych sprzężonych z nimi molekuł i czy możliwe jest modyfikowanie własności chemicznych na poziomie pojedynczej molekuły bądź w stanie kolektywnym (stworzonym przez wiele molekuł oddziałujących koherentnie z rezonatorem).