

TDK téma összefoglaló / Research summary (see below in English)

Írta: Szidarovszky Tamás

tamas.janos.szidarovszky@ttk.elte.hu

Az érdeklődő hallgatók további tudnivalók, szakirodalmi cikkek, stb. kapcsán keressenek bátran.
Interested students can feel free to contact me for further details, papers to read, etc.

Polaritonok a kémia szolgálatában

Mikroszkópikus méretű üregrezonátorba zárt molekulák a rezonátor elektromágneses módusaival igen erősen tudnak csatolni a fény kvantált természete miatt, ami különleges, úgynevezett polariton állapotok kialakulásához vezet. Ez gyakorlatilag azt jelenti, hogy az üregrezonátor elektromos terének különböző kvantumállapotai keverednek a molekula különböző sajátállapotaival, és már nem beszélhetünk külön anyagról és külön fényről, csak ezek hibrid keverékéről. Ezek a rendszerek érdekes és gyakorlati alkalmazásokra alkalmas tulajdonságokat mutatnak, például a hibrid állapotokon keresztül rendkívüli mértékben befolyásolható az abban résztvevő molekulák kémiai reaktivitása. A kvantumkémiai és kvantumoptikai módszerekre építő elméleti kutatás céljai: (1) vizsgálni polaritonállapotok létrejöttének a molekulák partíciós függvényére, termokémiai tulajdonságaira tett hatását; (2) polaritonállapotok optikai spektroszkópiájának vizsgálata; (3) többféle molekulát tartalmazó rendszerek polariton állapotainak esetében a rezonátortér által közvetített indirekt kölcsönhatás vizsgálata; (4) disszipatív folyamatok hatásának feltérképezése, stb.

Polaritons in the service of chemistry

Molecules confined in microscopic optical or plasmonic cavities can strongly interact with the quantized cavity mode, forming so-called polaritonic states, in which the eigenstates of matter and light are coherently mixed. These hybrid light-matter states can show promising features with potential applications in chemistry, for example, the formation of polaritons can influence molecular structure and chemical reactivity. The aim of this theoretical research project is to use the tools of quantum chemistry and quantum optics to investigate (1) how the formation of polaritons change molecular partition function and thermochemical properties, (2) the spectroscopic properties of polaritonic states, (3) the effects of cavity-mediated indirect coupling between different molecules contributing to collective polaritonic states, (4) the role of cavity loss and dissipative processes, etc.