Квантовый мост: учёные предсказали новые плазмоны

Научно-исследовательская группа учёных СФУ и ФИЦ КНЦ СО РАН предсказала существование нового типа плазмонов, связанных с переносом заряда. Эксперты оценивают полученный результат как весьма яркий и многообещающий с точки зрения создания основы для создания сверхчувствительных биосенсоров нового поколения. Работа опубликована в рейтинговом международном журнале Journal of Chemical Physics.

Наноплазмоника на сегодняшний день считается одной из самых быстроразвивающихся областей нанофотоники. Именно открытия в наноплазмонике могут внести решающий вклад в развитие биомедицины, солнечной энергетики и телекоммуникационных технологий. Исследователям из СФУ удалось предложить совершенно новый тип плазмонных частиц, которые имеют значительный потенциал.

«В отличие от хорошо известных „классических“ плазмонов, которые генерируются, например, в наночастицах серебра и золота под действием внешнего электромагнитного поля, мы рассмотрели плазмоны, появляющиеся в металлических (золотых) наночастицах, связанных посредством мостиков (линкеров) — проводящих органических молекул (рис. 1).

Поведение классических плазмонов хорошо описывается классическими же уравнениями Максвелла. А в нашем случае значительную роль играют скорее квантовые эффекты, поэтому стандартные программы для решения уравнений Максвелла неприменимы. Кроме того, существует проблема описания свойств наночастиц, которые можно описать полностью квантовыми методами за разумное время с ограничением в несколько сот атомов в наночастице.

Чтобы преодолеть это ограничение и провести расчёт плазмонных колебаний в рассматриваемой системе, мы разработали оригинальную гибридную квантово-классическую модель, учитывающую квантовые эффекты, с основными параметрами, полученными из квантово-химического моделирования», — отмечает один из авторов исследования, профессор СФУ **Александр Федоров**.

Учёные рассмотрели систему, состоящую из двух золотых наночастиц, связанных молекулой полиацетилена. Наночастицы в этой системе проявляют металлические свойства благодаря тепловому расширению уровней энергии вблизи энергии Ферми, которые важны для реализации предложенной модели возникновения плазмонов при переносе заряда между двумя наночастицами. При этом проводящая молекула-мостик фактически является одномерным проводником, в котором электроны или дырки движутся в баллистическом режиме из-за того, что длина свободного пробега носителей значительно превышает длину мостика.

«Ключевым моментом нашей модели является рассмотрение динамики электронов в системе, которая описывается на языке волновой функции. Под действием электрического поля электроны проводимости ускоряются, что приводит к изменению их квазиимпульса и кинетической энергии. Изменение этих величин можно легко рассчитать, зная только структуру соответствующей зоны и эффективную массу электрона. В разработанной нами теории мы установили связь между квантовыми и классическими величинами — квазиимпульсом, импульсом и внешней силой, действующей на свободные носители. Расчёты показали, что

рассматриваемая система действительно обладает металлическими свойствами и может проводить постоянный или переменный ток, что может приводить к появлению плазмонов. При этом плазмонная частота, которая и интересна для приложений, смещается в инфракрасную область», — пояснил старший научный сотрудник СФУ **Павел Краснов**.

Авторы работы провели ряд необходимых квантово-химических расчетов и установили, что предложенный новый тип плазмонов и связанная с ними плазмонная частота отличаются высокой чувствительностью к внешнему окружению.

«Мы полагаем, что предложенный тип плазмонов может широко применяться в качестве химических зондов и биозондов. Это связано с тем, что при адсорбировании внешних молекул на молекуле мостика проводимость этой „мостовой“ частицы будет очень резко меняться и это, в свою очередь, повлияет на частоту плазмонов, которую легко измерить. В принципе, разработанная нами гибридная квантово-химическая модель интересна и сама по себе. Она закладывает основу для достаточно простого квантово-классического моделирования плазмонных систем и может применяться в широком спектре ещё нерешённых задач плазмоники», — заключил соавтор исследования, ведущий научный сотрудник СФУ **Сергей Полютов**.

Сообщается, что исследование выполнено в рамках гранта РНФ (проект 18-13-00363).

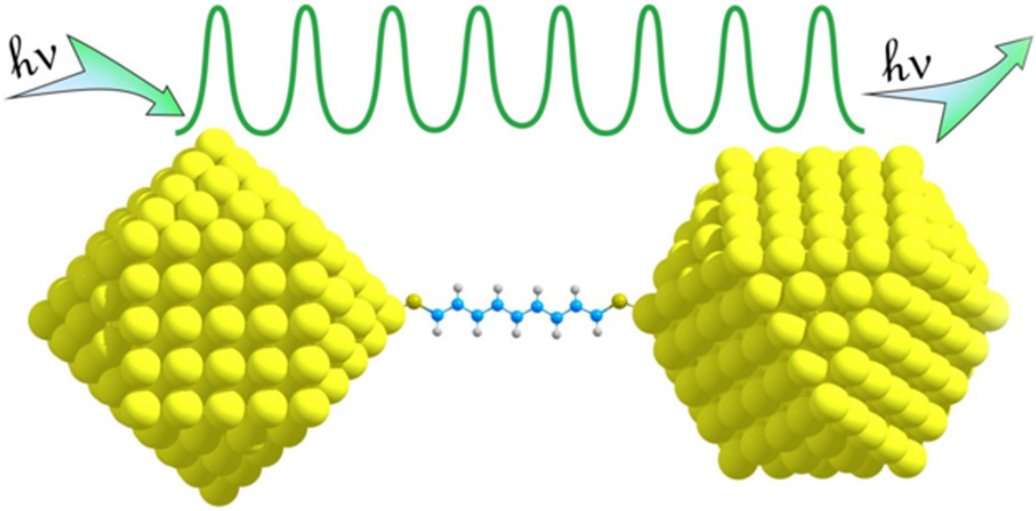

Рис. 1

Добавим, комплексное развитие направления «спектроскопия и квантовая химия» в СФУ поддержано Проектом 5-100.

Пресс-служба СФУ, 11 марта 2020 г.

© Сибирский федеральный университет. Редакция сайта: +7 (391) 246-98-60, info@sfu-kras.ru.

Адрес страницы: https://news.sfu-kras.ru/node/22913