

El puente cuántico: científicos predijeron nuevos plasmones

Un grupo de investigación de científicos de la SibFU y FIC KSC del SB RAS predijo la existencia de un nuevo tipo de plasmones relacionados con la transferencia de carga. Los expertos evalúan el resultado como brillante y prometedor desde el punto de vista de crear las bases para la creación de biosensores ultrasensibles de nueva generación. El trabajo [fue publicado](#) en la revista internacional de calificación Journal of Chemical Physics. международном журнале Journal of Chemical Physics.

Hoy en día la nanoplasmónica se considera una de las áreas de nanofotónica de desarrollo más rápidas. Los descubrimientos en nanoplasmónica pueden suponer una contribución decisiva al desarrollo de las tecnologías de biomedicina, energía solar y telecomunicaciones. Investigadores de la Universidad Federal de Siberia lograron descubrir un tipo completamente nuevo de partículas de plasmón que tienen un potencial significativo.

«En contraste con los conocidos plasmones «clásicos» que se generan, por ejemplo, en nanopartículas de plata y oro bajo la acción de un campo electromagnético externo, nosotros examinamos los plasmones que aparecen en nanopartículas de metal (oro) unidas por puentes (conectores) — moléculas orgánicas conductoras (fig.1)



El comportamiento de los plasmones clásicos está bien descrito por las ecuaciones clásicas de Maxwell. Y en nuestro caso, los efectos cuánticos juegan un papel importante, por lo tanto, los programas estándares para resolver las ecuaciones de Maxwell no son aplicables. Además, existe el problema de describir las propiedades de las nanopartículas, que pueden describirse completamente mediante métodos cuánticos en un tiempo razonable con una limitación de varios cientos de átomos en la nanopartícula.

Para superar esta limitación y calcular las vibraciones de plasmón en el sistema en consideración, desarrollamos un modelo híbrido cuántico clásico que tiene en cuenta los efectos cuánticos, con los principales parámetros obtenidos del modelado químico cuántico», — dijo uno de los autores del estudio, el profesor de la SibFU **Alexandr Fiódorov**.

Los científicos han considerado un sistema que consta de dos nanopartículas de oro unidas por una molécula de poliacetileno. Debido a la expansión térmica de los niveles de energía cerca de la energía de Fermi, las nanopartículas en este sistema exhiben propiedades metálicas, que son importantes para la implementación del modelo propuesto para la aparición de plasmones durante la transferencia de carga entre dos nanopartículas. En este caso, la molécula que forma el puente es en realidad un conductor unidimensional en el que los electrones o huecos se mueven en modo balístico debido al hecho de que el camino libre medio de los portadores excede significativamente la longitud del puente.



«El punto clave de nuestro modelo es la consideración de la dinámica de los electrones en el sistema descrito con la función de onda. Bajo la influencia de un campo eléctrico, los electrones de conducción se aceleran, lo que resulta en un cambio en su cuasimomento y energía cinética. El cambio en estas cantidades se puede calcular fácilmente, conociendo solo la estructura de la zona correspondiente y la masa efectiva del electrón. En la teoría que desarrollamos, hemos establecido una relación entre las cantidades cuánticas y clásicas: un cuasimomentum, momentum y una fuerza externa que actúa sobre los portadores libres. Los cálculos mostraron que el sistema considerado realmente tiene propiedades metálicas y puede conducir la corriente directa o la corriente alterna, lo que puede conducir a la aparición de los plasmones. Al mismo tiempo, la frecuencia de resonancia de plasmón, que es interesante para

las aplicaciones, se traslada a la región infrarroja», — dijo investigador principal de la Universidad Federal de Siberia **Páviel Krasnov**.

Los autores del trabajo llevaron a cabo una serie de cálculos cuánticoquímicos necesarios y descubrieron que el nuevo tipo propuesto de plasmones y la frecuencia de resonancia de plasmones, relacionada con él, son altamente sensibles al entorno externo.



«Suponemos que el tipo de plasmones propuesto puede usarse ampliamente como sondas químicas y biosondas. Esto se debe al hecho de que durante la adsorción de moléculas externas en la molécula del puente, la conductividad de esta partícula de puente cambiará muy bruscamente y esto afectará la frecuencia de resonancia del plasmón, que es fácil de medir. En principio, el modelo híbrido de química cuántica que desarrollamos es interesante en sí mismo. Sirve como la base para un modelado cuántico-clásico de los sistemas de plasmones bastante simple y puede usarse en una amplia gama de problemas no resueltos de plasmónica», — concluyó el coautor de la investigación, investigador líder de la Universidad Federal de Siberia **Serguéi Poliútov**.

CSe informa que el estudio se llevó a cabo en el marco de la subvención de la PHΦ ([proyecto 18-13-00363](#)).

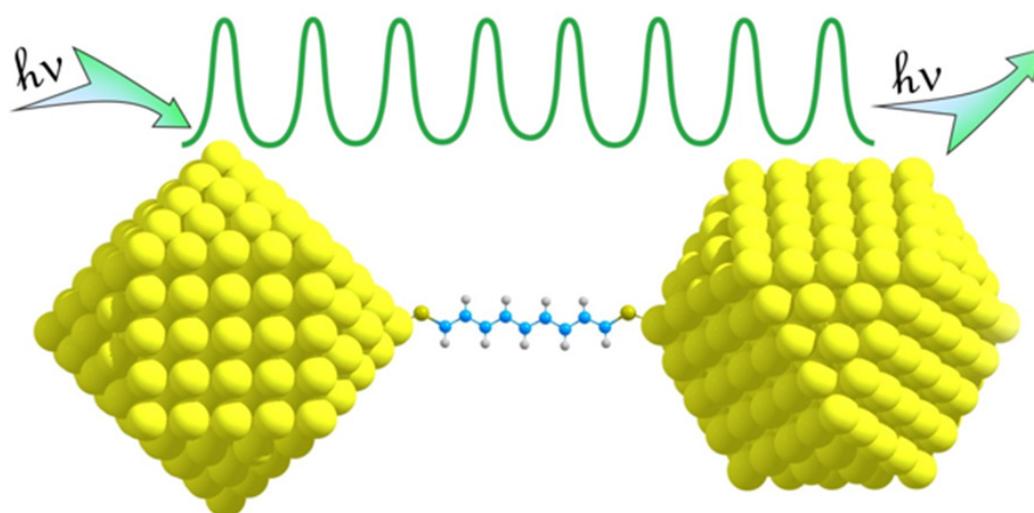


fig.1

21 abril 2020

© Universidad Federal Siberiana. Editorial Web: +7 (391) 246-98-60, info@sfu-kras.ru.

Dirección de la página Web: <https://news.sfu-kras.ru/node/23084>