

Powierzchniowe plazmony-polarytony są wzbudzeniem łączącym w sobie promieniowanie elektromagnetyczne oraz oscylacje elektronów przewodnictwa w metalach. Plasmony powierzchniowe zlokalizowane są na granicy pomiędzy przewodnikiem a otaczającym je dielektrykiem i cechują się silnie wzmocnionym polem elektromagnetycznym. Dzięki temu silnie wzmocnionemu polu ich wydajność oddziaływania ze światłem może być znaczna, np. nanocząstki zbudowane z metalu są w stanie oddziaływać z padającym nań światłem dużo bardziej, niż wynikałoby to z ich fizycznego rozmiaru, a silnie wzmocnione pole elektryczne wzmacnia wydajność procesów zachodzących w jego obszarze. Po wzbudzeniu, plazmony zanikają na jeden z dwóch sposobów. Odwrotnie do pobudzenia, mogą wyświecić swoją energię bądź zostać zaabsorbowane w metalu. Promieniowanie plazmonów w pole dalekie przez długi czas było i nadal jest podstawą działania wielu urządzeń, takich jak np. detektorów czułych na pojedyncze molekuly bądź kompaktowych, kierunkowych anten optycznych.

Drugi z kanałów zaniku plazmonów, tj. absorpcja, była przez długi czas uważana za zjawisko niepożądane, które pogarsza wydajność urządzeń. Opinia ta jest niewątpliwie prawdziwa w przypadku urządzeń bazujących na obserwacjach wyemitowanego światła bądź propagacji sygnału na granicy metal-dielektryk. Jednakże, należy pamiętać, że absorpcja plazmonu skutkuje generacją energetycznych nośników ładunku, a te chwilowo żyjące ładunki mogą zostać wykorzystane do różnych celów, gdy możliwa staje się ich ekstrakcja z metalowych nanocząstek. Potencjalne zastosowania tych gorących elektronów bądź dziur obejmują fotodetektory, układy fotowoltaiczne, fototermiczną terapię nowotworową, bądź reakcje chemiczne. Jednakże, aby wydobyć tych energetycznych ładunków mogła zająć wydajnie, niezbędna jest wiedza o tym, jak ich własności zależą od struktury czy kształtu nanocząstek plazmonicznych, ich składu, innych znajdujących się w pobliżu nanostruktur bądź materiałów jak np. molekuly bądź półprzewodniki. Zagadnienia te w skali kilkudziesięciu nanometrów bądź większej są dość dobrze poznane, ale w skali atomowej istniejąca wiedza jest dalece niewystarczająca.

Celem niniejszego projektu jest uzupełnienie tych braków poprzez poznanie, jak w skali atomowej nanocząstki nieszlachetnych metali przejściowych oddziałują ze światłem. W tym celu konieczne jest uprzednie rozwiązanie problemu wydajnego modelowania za pomocą narzędzi teorii funkcjonału gęstości w dziedzinie czasu (ang. *time-dependent density-functional-theory, TD-DFT*) takich nanocząstek, pojedynczych bądź kilku na raz, o rozmiarach rzędu kilkuset atomów. Umiejętność wydajnego modelowania pozwoli na ilościową charakteryzację generacji gorących nośników ładunku, zależności od struktury atomowej, składu i domieszek nanocząstek oraz ich otoczenia. Dzięki zastosowaniu narzędzi TD-DFT badania skupią się na bezpośredniej generacji wzbudzonych ładunków z metalicznych nanocząstek do adsorbatów bądź w samych adsorbatach.

Wyniki badań umożliwią poznanie procesów rządzących generacją gorących elektronów i dziur za pomocą plazmonów w zależności od rodzaju, kształtu, składu, oraz otoczenia nanocząstek metalicznych. Pozwoli to na racjonalne zaprojektowanie wielofunkcyjnych kompleksów do pozyskiwania i konwersji światła w przydatną pracę. Urządzenia oparte o takie kompleksy będą umożliwiały zachodzenie wydajnej fotokatalizy wspomaganą plazmonami, ultraczułe detektory promieniowania rejestrujące pojedyncze fotony, lub pozyskiwanie energii w ogniwach fotowoltaicznych.