

„Światło w chemii i chemia światła okiem fizyka”

Małgorzata Wierzbowska

Instytut Wysokich Ciśnień PAN „Unipress”

Absorpcja światła często powoduje przeniesienie ładunku lub spinu, co prowadzi do ogromnych zmian oraz przeorganizowania wiązań chemicznych – jedne pękają inne powstają. Jeżeli kryształ jonowy – użyty np. w baterii słonecznej – ma być fotostabilny, to absorpcja światła powinna przenosić elektron pomiędzy elementami, które nie są podstawą jego konstrukcji. Absorpcja zwykle zachodzi w obszarze przerwy energetycznej, a zatem można tak chemicznie manipulować przebiegiem pasm walencyjnych i przewodnictwa aby to osiągnąć.

Czy wyższe pasma elektronowe – zwykle zdelokalizowane – nigdy nie mogą brać udziału w silnej akcji laserowej, która wymaga szybkich przejść optycznych?

Czy mieszając dwa materiały, które nie wykazują silnej absorpcji brzegowej – nieodzownej do pompowania elektrycznego – można uzyskać własności zupełnie różne od wypadkowej składników, a w dodatku z góry przewidzieć efekt?

A gdyby wolna para elektronowa zareagowała z częścią układu i utworzyła nowe wiązanie chemiczne, czy można w ten sposób uzyskać dwie pary elektron-dziura z absorpcji jednego fotonu? Poświećmy na materiał antyferromagnetyczny. Czy przestanie być magnetyczny w stanie wzbudzonym a po powrocie do stanu podstawowego ponownie się namagnesuje? Moglibyśmy w ten sposób manipulować spinem na odległość.

Jakimi cząsteczkami przekładać warstwy półprzewodnika aby był dobrym piezoelektrykiem?

Odpowiem na te pytania i pokażę jak policzyć własności dielektryczne materiałów metodami z pierwszych zasad opartych na rachunku zaburzeń. Omówię rolę sprzężenia elektron-dziura oraz lokalizacji ekscytanu – wizualnie i intuicyjnie.