

## Pressemitteilung

Max-Planck-Institut für Struktur und Dynamik der Materie

Jenny Witt

09.12.2020

<http://idw-online.de/de/news759648>

Forschungsergebnisse, Wissenschaftliche Publikationen  
Energie, Physik / Astronomie, Werkstoffwissenschaften  
überregional



## Genauere theoretische Modellierung zeigt tiefgreifende Veränderungen von Molekülen im Quantenlicht

**Ein Forschungsteam aus Italien, Norwegen und Deutschland hat gezeigt, dass sich die Eigenschaften von Molekülen signifikant verändern, wenn sie mit quantisierten elektromagnetischen Feldern in optischen Hohlräumen wechselwirken.**

Mit Hilfe neuartiger theoretischer Methoden und Computersimulationen weist das Team nach, dass die Chemie von Molekülen im Grund- und angeregten Zustand durch einen Einschluss in einem Hohlraum modifiziert werden kann. Die Forscher zeigen, wie die Modulation der Resonatorfeldfrequenz den Elektronentransfer innerhalb des Systems steuern kann. Ihre neu entwickelte Methodik ist potentiell wichtig für viele chemische und technologische Anwendungen, wie z.B. Photovoltaik, Photochemie und optoelektronische Geräte. Die Arbeit des Teams ist in *Physical Review X* erschienen und wurde in einem "Viewpoint" hervorgehoben.

Die Hohlraum-Quantenoptik befasst sich mit den Wechselwirkungen von Photonen und Molekülen in einem optischen Hohlraum, der beispielsweise zwischen zwei dicht beieinander liegenden Spiegeln eingeschlossen ist. Perfekte optische Hohlräume können nur bestimmte Frequenzen des Lichts unterstützen und verstärken die Intensität des damit verbundenen elektromagnetischen Feldes. Dies verursacht tiefgreifende Veränderungen im Verhalten von dort platzierten Molekülen. In dieser Situation können sich Photonen und Moleküle koppeln und neue Hybridzustände, sogenannte Polaritonen, bilden.

Bemerkenswert ist, dass diese Hybridzustände Eigenschaften sowohl der Moleküle als auch der Photonen aufweisen. Dadurch kann ihr chemisches Verhalten optisch manipuliert werden, zum Beispiel durch Änderungen der Photonenenergie und der Hohlraumgeometrie. So stellen Hohlräume einen völlig neuen Hebel zur Steuerung molekularer Eigenschaften dar.

Noch sind die Eigenschaften von Molekülen in Hohlräumen nicht ausreichend verstanden. Die theoretische Modellierung in der Quantenoptik bietet zwar eine ausführliche Beschreibung des elektromagnetischen Feldes im Hohlraum, nicht jedoch des Moleküls. Die bislang einzige Methode, die Elektronen und Photonen auf dem gleichen Quantisierungsniveau behandelt, ist die quantenelektrodynamische Dichtefunktionaltheorie, aber sie ist wiederum auf Situationen beschränkt, in denen Elektronen und Photonen unkorreliert sind.

Genau diese Korrelation zwischen Elektronen und Photonen ist entscheidend für die Erfassung von Änderungen der molekularen Eigenschaften, auch qualitativ. "Diese Korrelationseffekte waren unser Schwerpunkt", sagt Tor Haugland, Doktorand an der Norwegischen Universität für Wissenschaft und Technik und Hauptautor der Arbeit. "Unsere Theorie ist die erste ab initio-Theorie, die eine starke Elektron-Photon-Korrelation explizit in einer kohärenten und systematisch verbesserungsfähigen Weise einbezieht

Die Forscher erweiterten die etablierte gekoppelte Cluster-Theorie für elektronische Strukturen um die Quantenelektrodynamik. Mit dieser neuen theoretischen Methode konnten sie zeigen, dass die Oberflächen der potentiellen Energie im Grundzustand durch den Hohlraum in der Nähe von konischen Wechselwirkungen modifiziert werden. "Dieser Ansatz ebnet den Weg für neuartige Strategien zur Steuerung der Molekularchemie", sagt Co-Autor Enrico Ronca, der inzwischen vom MPSD an das Institut für Physikalisch-Chemische Prozesse des Consiglio Nazionale delle Ricerche in Italien gewechselt ist. "Wir brauchen solide theoretische Methoden, um die grundlegenden Prozesse zu verstehen, die uns helfen können, Atome und Moleküle mit Quantenlicht zu manipulieren".

Die Ergebnisse des Teams könnten das derzeitige Verständnis der Relaxationswege und der Photochemie von Molekülen erheblich verbessern. Das Team setzt sich aus Forschern mehrerer europäischer Institutionen zusammen, darunter die Scuola Normale Superiore (SNS) und das Istituto per i Processi Chimico-Fisici des CNR (IPCF-CNR), beide in Pisa (Italien), die Norwegische Universität für Wissenschaft und Technologie (NTNU) in Trondheim (Norwegen) und das Max-Planck-Institut für Struktur und Dynamik der Materie (MPSD) in Hamburg.

wissenschaftliche Ansprechpartner:

Prof. Henrik Koch, corresponding author: [henrik.koch@sns.it](mailto:henrik.koch@sns.it)

Originalpublikation:

<https://journals.aps.org/prx/abstract/10.1103/PhysRevX.10.041043>

URL zur Pressemitteilung: <https://www.mpsd.mpg.de/488836/2020-12-ronca-cavities>

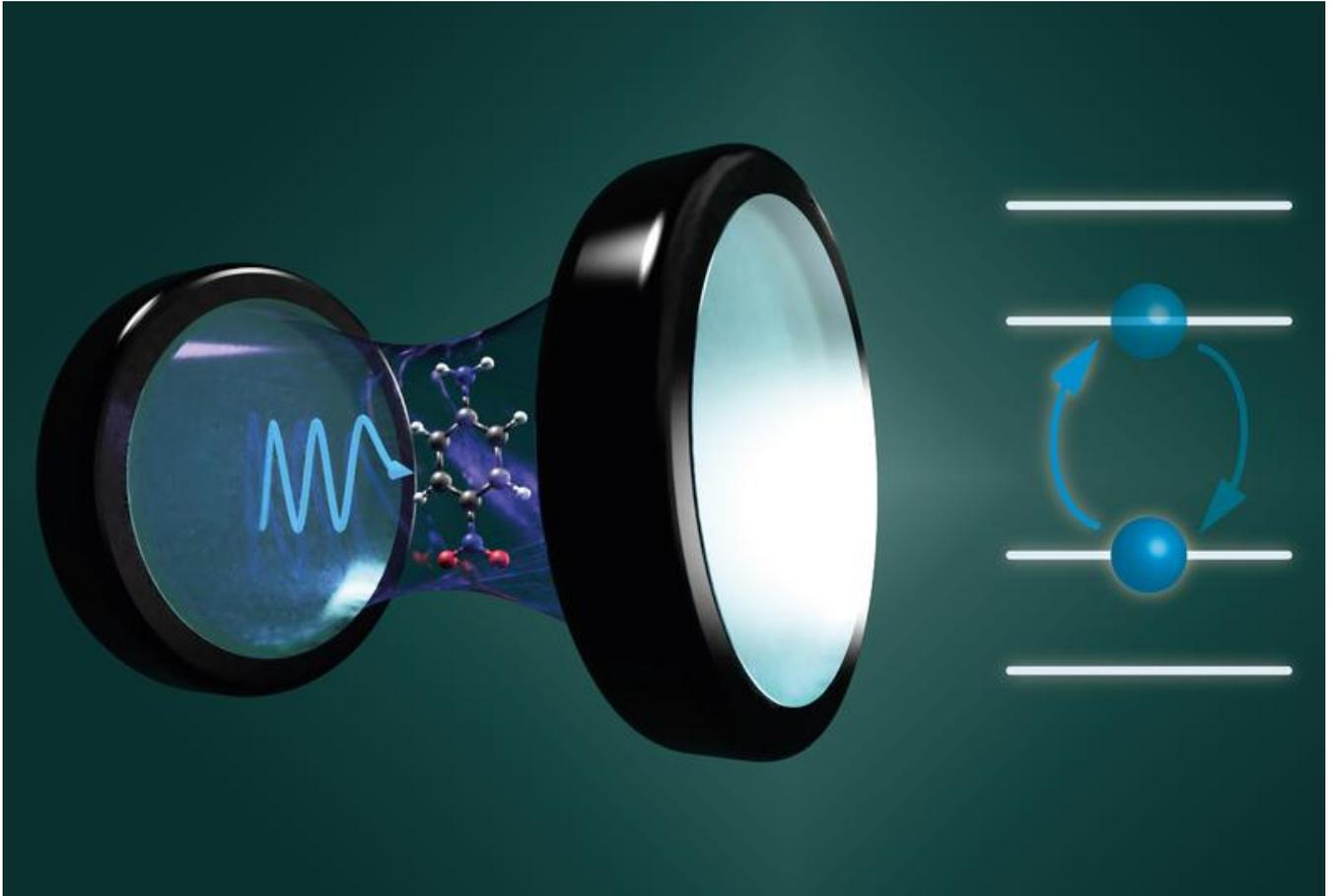


Illustration der Wechselwirkung eines Moleküls mit dem Quantenvakuumfeld in einem optischen Hohlraum  
Enrico Ronca / Jörg Harms, MPSD