

Výpočet spekter interagujících molekulárních excitací

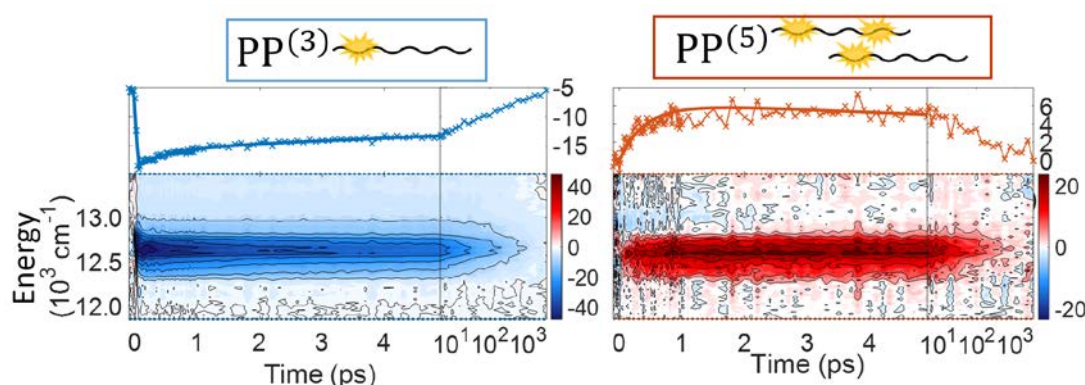
Vedoucí projektu: RNDr. Pavel Malý, Ph.D. (pavel.maly@matfyz.cuni.cz)

Pracoviště: Fyzikální ústav UK, Ke Karlovu 5, Praha

Klíčová slova: ultrarychlá spektroskopie, přenos excitační energie, excitonová anihilace

V látkách interagujících se světlem, jako jsou solární články, fotosyntetické komplexy, nebo i optoelektronické součástky, je přenos světlem excitované energie klíčový pro jejich správné fungování. Při větší intenzitě osvětlení může v látce vzniknout více excitací najednou, které pak mohou interagovat, přičemž nejčastěji je tato interakce destruktivní – dochází k anihilaci. Nedávno jsme vyvinuli novou variantu ultrarychlé spektroskopie, která umožňuje dynamiku jedné a dvou excitací přímo sledovat v čase a energii [1]. Vzhledem k jednoduchosti metody se její využití rychle šíří mezi výzkumnými skupinami na světě. Zatímco původ signálu je jasný, jeho interpretace je o mnoho komplikovanější, zejména co se týče vývoje energie (tj., spektra) excitací v čase.

Náplní tohoto teoretického projektu je výpočet časově rozlišených dvou-excitačních spekter molekulárních komplexů. Student(ka) se seznámí s kvantově-mechanickým popisem optické odezvy, a samostatně spočítá spektra daných systémů pomocí dostupného výpočetního programu. Cílem je pomocí systematické změny fyzikálních vlastností systému (energie, vazby, vibrace ...) reprodukovat změřená experimentální data, objasnit jejich konkrétní interpretaci a schopnosti metody jako takové. Teorie nejsou jen gravitační vlny v n -rozměrném prostoročase! Přijďte si vyzkoušet kvantově-mechanické výpočty v těsném kontaktu s moderními experimenty.



Časově (vodorovná osa) a energeticky (svislá osa) rozlišená spektra jedné excitace (vlevo) a dvou interagujících excitací (vpravo) v organických polymerech. Původ negativního spektra (modře) v dvou-excitačním signálu není znám.

[1] P. Malý et al., [Separating single- from multi-particle dynamics in nonlinear spectroscopy](#), Nature 616, 280 (2023)