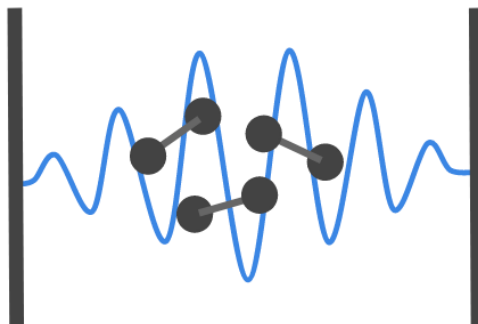


Polaritonok a kémia szolgálatában

Talán ismeretes dolog, hogy a mikrovilág apró szereplőit, atomokat, molekulákat a kvantumfizika segítségével kell értelmeznünk. Így van ez a fény esetében is, ha a fényt mikroméretű térrészbe szorítjuk be. Egy érdekesség ezzel kapcsolatban, hogy a fény kvantumelmélete szerint, ha minél kisebb, tükröző falú dobozba zárjuk a fényt alkotó fotonokat, azok annál erősebbek lesznek, azaz egy foton annál nagyobb elektromos teret tud létrehozni. Manapság a nanotechnológiának köszönhetően már lehet akár mikrométeres, vagy pár száz nanométeres apró dobozokat is kialakítani, amiben a fotonok ereje akár sokmilliószorosára növekedik a szobában körülöttünk lévő fotonokéhoz képest. Ez azért érdekes egy vegyész számára, mert a molekulákat töltött részecskék (az atommagok és elektronok) alkotják, melyekre a fotonok által keltett elektromágneses tér segítségével erőt lehet kifejteni. A kvantumfizika nyelvén a nagyerejű fotonok hatása úgy jelenik meg, hogy a foton és a molekula összeolvad, létrehozva egy fény-anyag keveréket, amit polaritonnak hívunk. A polaritonkémia az ilyen fény-anyag állapotoknak a molekulák tulajdonságaira, reaktivitására való hatásával foglalkozik [1,2].



Kutatásom célja pontos elméleti modellek kidolgozása és alkalmazása annak feltérképezésére, hogy a polaritonok létrejötte hogyan befolyásolja molekulák szerkezetét, stabilitását, kémiai reaktivitását. A megértés által lehetőség nyílik új fényindukált folyamatok tervezésére is, azaz az általunk kívánt kémiai folyamatok fényrel történő irányítására, eddig tiltott kémiai reakciók beindítására, létező reakciók hatékonyabbá tételére, új molekulák és anyagok szintetizálására. Az anyagnak elektromágneses sugárzással történő molekuláris szintű manipulálása azt jelenti, hogy a kémia törvényeit nem csupán tudomásul vesszük, hanem újra is definiálhatjuk, ezzel megteremtve egy hatékonyabb, zöldebb és sokoldalúbb kémiatudományt.

[1] J. Yuen-Zhou, V. M. Menon, *Proc. Natl. Acad. Sci.* **116**, 5214-5216 (2019).

[2] F. Herrera és J. Owrutsky, *J. Chem. Phys.* **152**, 100902 (2020).