

Streszczenie

Układ antena-reaktor zawiera antenę optyczną zdolną do skupiania światła w nanoskali oraz nanocząstki metali przejściowych, które słabo oddziałują ze światłem, ale wykazują się wydajną aktywnością katalityczną. Sprężenie elektromagnetyczne w tym układzie prowadzi do zwiększenia absorpcji światła w nanocząstkach metali przejściowych, co umożliwia zastosowania takich układów optycznych do monitorowania zjawisk związanych z katalizą oraz przeprowadzenie fotokatalizy wspomaganej plazmonami.

W niniejszej pracy doktorskiej przedstawiono teoretyczne badania nad elektromagnetycznym sprężeniem w układzie antena-reaktor zachodzącym w trzech skalach długości obecnych w tym układzie: w skali makroskopowej, na poziomie pojedynczej anteny i w skali atomowej. W skali makroskopowej sprężenie elektromagnetyczne wpływa na odpowiedź optyczną przez wielokrotne rozpraszanie. W eksperymentalnych realizacjach układu, nanoanten są rozmieszczone losowo. Z tego względu, opracowano model oparty na metodzie macierzy T aby opisać ich efektywne właściwości optyczne. Wykazano, że oprócz właściwości samych nanoanten, kluczowym parametrem określającym sprężenie elektromagnetyczne jest minimalna odległość między środkami anten. Zaproponowane rozwiązanie umożliwia sformułowanie analitycznych równań opisujących ich własności optyczne, które można zastosować do optymalizacji przyszłych urządzeń opartych o amorficzne macierze nanoanten.

W celu modelowania własności pojedynczej struktury typu antena-reaktor zaproponowano realistyczny model zarówno samej nanoanteny jak i warstwy nanocząstek metali przejściowych. Model pozwala na modelowanie wprost, tj. przy użyciu metod numerycznych, albo za pomocą gradientowego modelu ośrodka efektywnego opracowanego przez autora rozprawy. Umożliwia to badanie wzmocnienia absorpcji i przedstawienie użytecznych metod maksymalizacji tego efektu w próbkach eksperymentalnych. Ponadto, wyniki wskazują na to, że zmiana właściwości zarówno anteny jak i nanocząstek metali przejściowych prowadzi do zmiany odpowiedzi optycznej, co można zastosować do optycznego monitorowania zmian układu podczas katalizy.

Realistyczne modelowanie zjawisk zachodzących w badanym układzie w skali atomowej wymaga zastosowania czasowo zależnej teorii funkcjonatu gęstości. W tej skali możliwe jest realistyczne modelowanie procesu powstawania i zaniku plazmonu, które prowadzi do generacji tzw. gorących nośników. W niniejszej rozprawie wykazano, że obecność nanoanteny wzmacnia generację gorących nośników w układzie antena-reaktor w porównaniu do nanoklastrów metali przejściowych i zbadano czynniki wpływające na obserwowane wzmocnienie.

Przedstawione badania wskazują na to, że układ antena-reaktor wykazuje potencjał do wzmacniania oddziaływania między światłem a nanocząstkami metali przejściowych, prowadząc do zastosowań czujnikowych oraz w fotokatalizie.