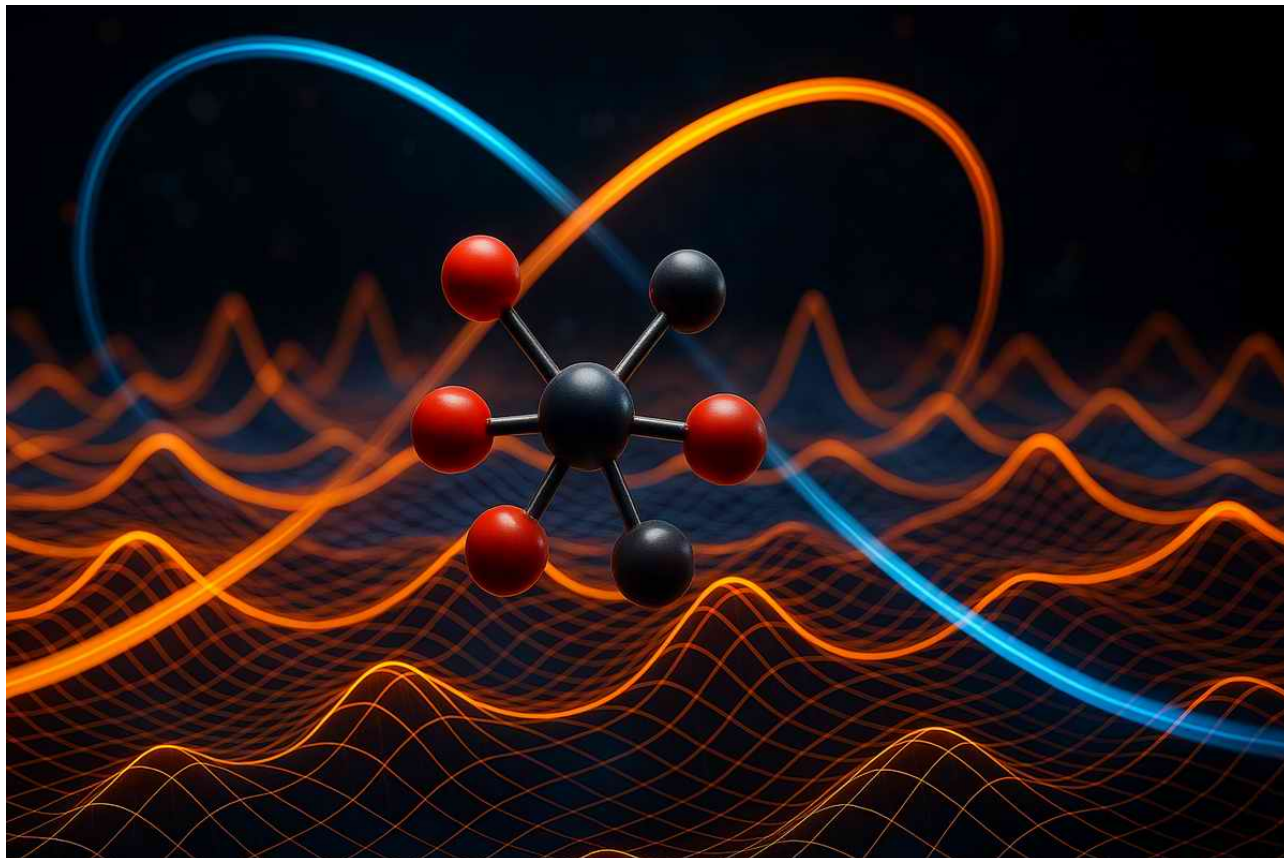


Квантовая запутанность в молекулярных поляритонах: новый взгляд через моделирование из первых принципов



Дата публикации: 16.09.2025

В мире современной квантовой науки и химии всё больше внимания уделяется поляритонам — квазичастицам, возникающим при сильном взаимодействии света и материи. Эти гибридные состояния обладают особыми свойствами, которые могут не только изменить наше понимание динамики молекул, но и открыть путь к практическим технологиям управления химическими реакциями с помощью света. Новое исследование группы профессора Шэрон Хаммес-Шиффер из Принстонского университета представляет собой шаг в этом направлении, показывая, что моделирование из первых принципов способно выявить квантовую запутанность в динамике молекулярных поляритонов.

Работа опубликована в Journal of Chemical Theory and Computation и включает целую иерархию моделей — от полуклассического подхода до полностью квантового описания. Учёные применили теорию функционала плотности в традиционной и расширенной форме ядерно-электронных орбиталей, чтобы

исследовать, как ведут себя молекулы в условиях сильной связи с электромагнитными полями в оптической полости. Такой подход позволил проследить динамику как на электронной, так и на колебательной шкале энергии.

На первый взгляд, смоделированные спектры и характерные признаки — например, расщепление Раби и положение энергетических пиков — можно описать классически. Однако более глубокий анализ выявил признаки квантовой запутанности между фотонами и молекулами, которые принципиально невозможно объяснить с позиции классической физики. Именно эта запутанность делает систему уникальной и указывает на то, что для её полного описания необходимо квантовое представление света.

Фундаментальное значение работы состоит в том, что исследователи предложили чёткие ориентиры для экспериментаторов, позволяющие различать классическое и квантовое поведение. Например, они показали, что усиление связи между молекулой и электромагнитным полем в полости увеличивает вероятность наблюдать эффекты запутанности. Если в будущем удастся экспериментально подтвердить эти предсказания, это станет прорывом в понимании квантовой химии и динамики молекулярных систем.

Практические последствия трудно переоценить. Уже сегодня есть данные, что реакции в оптических полостях протекают с другой скоростью и селективностью по сравнению с обычными условиями. Возможность контролировать такие процессы через свет открывает новые горизонты для катализа, фотохимии и разработки устойчивых материалов. Кроме того, понимание запутанности света и материи имеет значение для квантовых технологий: от сенсоров и квантовой связи до алгоритмов искусственного интеллекта, имитирующих гибкость мозга.

Исследование демонстрирует силу моделирования из первых принципов как инструмента для изучения систем, где экспериментальные методы пока ограничены. Применение ядерно-электронных орбиталей и сложных уравнений фон Неймана позволяет смоделировать поведение даже одной молекулы в квантовой полости с беспрецедентной точностью. Такой уровень детализации необходим, чтобы увидеть, как в самых малых масштабах рождаются эффекты, способные повлиять на глобальные технологии будущего.

Работа Хаммес-Шиффер и её коллег стала лишь первым шагом. Дальнейшие исследования будут направлены на расширение модели для систем с несколькими молекулами, что приблизит теорию к реальным экспериментальным условиям. Это позволит понять, как коллективные эффекты и масштабирование меняют динамику поляритонов, и даст возможность лучше

предсказывать результаты лабораторных наблюдений.

Таким образом, новое исследование не только выявило важное различие между классическим и квантовым описанием света в молекулярных системах, но и заложило основу для будущих открытий в квантовой химии и фотонике. Запутанность, обнаруженная в моделях, подтверждает, что на стыке света и материи скрыт колоссальный потенциал для науки и технологий.

Ссылка: «Запутывание света и материи в ядерно-электронной орбитальной динамике поляритонов в реальном времени» DOI: [10.1021/acs.jctc.5c00911](https://doi.org/10.1021/acs.jctc.5c00911).