

# Modelización Teórica del Transporte de Excitones

Samuel Díaz Escribano

23 de mayo de 2016

## Resumen

En este trabajo se demuestra que la conducción de energía a través de un material orgánico o semiconductor puede verse incrementada si se acopla fuertemente con un modo electromagnético. Para ello hemos estudiado de manera teórica el transporte de excitones mediante un modelo unidimensional, descubriendo que la formación de polaritones permite transportar la excitación desde un extremo del sistema directamente hasta el otro. Demostraremos que este nuevo canal de conducción propaga la energía de manera mucho más eficiente que a través del propio material cuando éste es suficientemente grande.

## 1. Introducción

El creciente consumo energético a nivel mundial [1] ha llevado a muchos ciudadanos a tomar una mayor conciencia ecológica debido al alto nivel contaminante de los combustibles fósiles, principal fuente de energía actual. La energía solar se postula como una alternativa frente a éstos [2], ya que su impacto sobre el medioambiente es mínimo. Sin embargo, el coste de producción de las células solares que permiten transformar la radiación solar en energía eléctrica es mayor que el coste de extracción y refinamiento de las energías fósiles [3, 4]. Esto es debido al alto coste de fabricación y ensamblaje de los componentes semiconductores que conforman dichas células. Durante los últimos años se ha conseguido desarrollar células solares a partir de materiales orgánicos [5], las cuales son más baratas y además facilitan la producción de las mismas. Su principal desventaja es que en ellas la energía se propaga de manera menos eficiente que en las células convencionales [6].

El transporte de excitones es el principal mecanismo de propagación de energía que toma parte en estos sistemas [7, 8]. Este transporte está presente además en otra multitud de fenómenos físicos, tales como la fotosíntesis [9], donde las moléculas más externas del organismo al absorber luz solar ionizan agua creando un excitón, el cual se propaga a través del resto de las moléculas hasta un centro de reacción, donde la energía del excitón se invierte en crear azúcares. Estos excitones [10] son cuasi-partículas (cuantos de excitación electrónica fundamental) que se forman cuando un electrón y un hueco se ligan a través de la interacción coulombiana. El excitón es entonces neutro de carga, posee un momento dipolar, y su movimiento sólo conlleva transporte de energía. Es por tanto crucial para el desarrollo de las células solares orgánicas conocer cómo se propagan los excitones y cómo mejorar la eficiencia de su transporte.

En este trabajo se expone una posible vía para incrementar dicha eficiencia: acoplar al sistema con una microcavidad óptica. Estas microcavidades [12] consiguen confinar la luz en pequeños volúmenes aprovechándose de fenómenos de resonancia. Mostraremos que en esta situación los fotones y los excitones se acoplan formando otra cuasi-partícula llamada polaritón [13], la cual contribuye también al transporte de energía. La ventaja que ofrecen los polaritones es que se propagan (en parte) a través de la microcavidad,

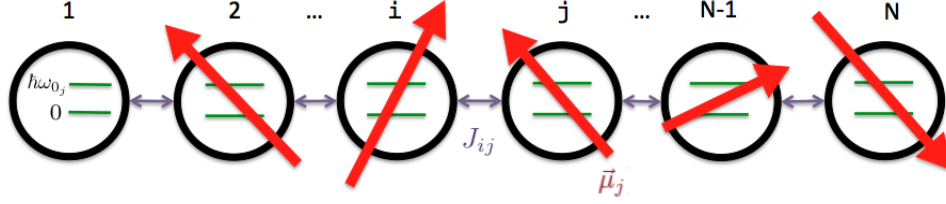


Figura 1: Representación esquemática del sistema físico: cristal unidimensional de átomos o moléculas (emisores) que interactúan entre sí mediante una interacción de tipo dipolo-dipolo  $J_{ij}$ . Suponemos que cada emisor tiene dos posibles niveles de energía electrónicos discretizados  $\{0, \hbar\omega_{0j}\}$ , y un momento dipolar  $\vec{\mu}_j$  que puede apuntar en cualquier dirección.

la cual presenta mejores condiciones para la propagación de energía debido a que sus características pueden ser fácilmente manipulables, y que, en general, presenta menores pérdidas que el medio sobre el que se propagan los excitones.

En el apartado 2 modelizaremos el sistema con el objetivo de comprender cómo funciona el transporte de energía a través de la propagación excitónica. En el apartado 3 estudiaremos además la eficiencia de la propagación cuando se bombea la excitación al sistema, a imitación del sol en la fotosíntesis o con las células fotovoltaicas. En el apartado 4 se hará una breve introducción a las cavidades ópticas, lo cual nos permitirá estudiar en el apartado 5 qué cambios y qué ventajas introduce acoplar al sistema con una de éstas. Por último, en el apartado 6 se exponen las conclusiones de este trabajo.

## 2. Transporte excitónico a lo largo de una cadena de emisores

Queremos obtener los aspectos más generales de la propagación de excitones en un material (como puede ser una célula solar) para conocer cómo de eficiente es ésta. Por ello hemos modelizado el sistema como se indica en la Fig.1: una cadena unidimensional de subsistemas (que llamamos emisores) etiquetados con un subíndice  $j$  que tienen dos posibles niveles de energía. Estos emisores representan átomos o moléculas fijos en un cristal. Cuando sobre ellos incide radiación, se excitan pasando de un estado fundamental que tomamos con energía 0, a un estado electrónico superior con energía  $\hbar\omega_{0j}$  respecto a dicho estado fundamental. Cuando estos dos estados se superponen, aparece un momento dipolar eléctrico  $\mu_i$ , haciendo que los emisores interactúen entre sí mediante una interacción electromagnética de tipo dipolo-dipolo, donde  $J_{ij}$  es la tasa de transmisión de energía entre dos dipolos. Este acoplo entre emisores provoca que al excitarse un emisor, la excitación pueda propagarse por la cadena. Si bien se podría pensar que puede haber más de un estado excitado, suponemos que estos dos estados están energéticamente diferenciados respecto al resto, o bien porque la escala de energías respecto al resto de estados es muy pequeña, o bien porque somos capaces de seleccionar la energía del estado excitado al promover al electrón.

El hamiltoniano que hemos tomado para modelizar al sistema es:

$$H_0 = \sum_{j=1}^N \hbar \left( \omega_{0j} - i \frac{\gamma_j}{2} \right) (\sigma_j^+ \sigma_j) + \sum_{j=1}^{N-1} \hbar J_{j,j+1} (\sigma_j^+ \sigma_{j+1} + \sigma_j \sigma_{j+1}^+), \quad (1)$$

donde  $\sigma_j^+$  y  $\sigma_j$  son los operadores de creación y destrucción de excitación que actúan sobre el emisor  $j$ , y  $\gamma_j$  es la tasa de disipación de energía por unidad de tiempo. Este factor

imaginario simula las pérdidas del sistema: como el hamiltoniano es no unitario, la probabilidad total del sistema no se puede conservar. Esta excitación que “desaparece” simula los efectos de disipación de energía por parte del sistema, que pueden deberse tanto a la absorción o emisión de energía mediante otros canales, tales como la excitación térmica o la luminiscencia. Nótese que en este hamiltoniano sólo hay interacción a primeros vecinos. Esta aproximación es lícita puesto que la interacción dipolo-dipolo:

$$\hbar J_{ij} = \frac{\mu_i \mu_j}{4\pi \epsilon_0 R_{ij}^3} \left[ (\hat{\mu}_i \cdot \hat{\mu}_j) - 3 (\hat{R}_{ij} \cdot \hat{\mu}_j) (\hat{\mu}_i \cdot \hat{R}_{ij}) \right], \quad (2)$$

donde  $\hat{\mu}_i$  es el vector unitario en la dirección del momento dipolar,  $R_{ij}$  es la distancia entre emisores, y  $\hat{R}_{ij}$  su dirección, presenta una dependencia con la distancia como  $R^{-3}$ , de modo que las moléculas alejadas entre sí sentirán una interacción mucho menor que las cercanas. Aun así, considerar una interacción a vecinos más lejanos no afecta cualitativamente a los resultados que aquí se presentan.

Para saber cuan buena es la conducción en un sistema real y para poder realizar nuestras simulaciones, necesitamos tener una idea de los órdenes de magnitud que los parámetros del hamiltoniano tendrían en un sistema real. Típicamente, en semiconductores, el estado energético excitado  $\hbar\omega_0$  es del orden del “gap”, es decir, del orden de 1 eV. En materiales orgánicos, éste es del mismo orden de magnitud [10], pero en torno 2 – 5 eV. La pérdida de energía  $\hbar\gamma$  debida a las vibraciones de la red o de las moléculas, que consideramos que es la más importante, se puede tomar del orden de  $k_B T$ , de modo que a temperatura ambiente es entre 1 – 10 meV. La energía de interacción  $\hbar J$  en moléculas simples se puede estimar a partir de la Ec.(2). Suponiendo una distancia entre emisores del orden de la celda unidad en un cristal semiconductor (1Å), y un momento dipolar del orden del creado por el par electrón-núcleo ( $10^{-31} - 10^{-30}$  C·m) de un átomo ligero, se obtiene que dicha energía es del orden de 0,01 – 0,1 eV. En materiales orgánicos esta energía de interacción es más difícil de estimar debido a la gran variedad de moléculas existentes, pero se ha medido experimentalmente [11] que ésta varía entre 0,001 – 0,1 eV.

Los autoestados y autovalores (energías) del hamiltoniano permiten conocer la dinámica del sistema, aportando una imagen de la propagación de excitones. Hemos restringido este estudio al subespacio de una única excitación por simplicidad y para entender de forma más nítida este fenómeno; y además hemos tomado todos los emisores iguales con  $\omega_0 = \omega_0$  y  $J_{ij} = J$ . Así, la parte real de las energías del sistema es:

$$E_\alpha = \hbar\omega_0 + 2\hbar J \cos\left(\frac{\alpha\pi}{N+1}\right), \quad (3)$$

donde  $\alpha$  es un número natural entre  $[1, N]$  que etiqueta los autoestados, y  $N$  es el número de emisores que conforman la cadena. Esta expresión constituye la relación de dispersión del sistema. La parte imaginaria de la relación de dispersión es simplemente  $\hbar\gamma/2$ , de modo que  $1/\gamma$  corresponde a la vida media del excitón. A partir de las pérdidas que hemos estimado antes se puede obtener que esta vida media es del orden de 100 – 10 fs. Los autoestados de este sistema vienen dados por la expresión:

$$|\alpha\rangle = \sum_{j=1}^N \sqrt{\frac{2}{N+1}} \sin(k_\alpha j) \sigma_j^+ |0\rangle, \quad (4)$$

donde el estado  $|0\rangle$  es el estado fundamental de cero excitaciones, y el pseudo-número de onda  $k_\alpha = \frac{\alpha\pi}{N+1}$ , que es adimensional. Los autoestados del sistema son ondas cuasi-estacionarias (pues tienen una cierta vida media) con pseudo-longitud de onda  $\lambda_\alpha = 2\pi/k_\alpha$ . Aquellos con un número de onda muy pequeño, tendrán una energía mayor, y por tanto, una velocidad de fase muy alta; mientras que aquellas con un número de onda muy alto, tendrán una energía menor y una velocidad de fase más pequeña. Como la

velocidad de grupo  $v_g = \frac{1}{\hbar} \frac{dE}{dk}$  es no lineal, este sistema constituye un medio dispersivo para la propagación de la excitación.

Usando la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo, un estado cualquiera de una excitación se puede expresar como una combinación lineal autoestados con coeficientes de proporcionalidad  $C_\alpha$ :

$$|\psi(t)\rangle = \sum_{\alpha=1}^N C_\alpha e^{-i \frac{E_\alpha t}{\hbar}} |\alpha\rangle. \quad (5)$$

Dado que el hamiltoniano es no unitario, los autoestados, en general, no tienen porqué ser ortogonales entre sí, de modo que los coeficientes no se pueden hallar a partir de la condición inicial  $|\psi(t=0)\rangle$  proyectando con  $\langle\alpha|$ . En lugar de esto, es necesario hacer un desarrollo biortogonal [14], en el que se utiliza que las autofunciones  $|\beta\rangle$  del hamiltoniano hermítico conjugado:

$$H_0^\dagger |\beta\rangle = \lambda_\beta |\beta\rangle, \quad (6)$$

sí son ortogonales a las autofunciones del hamiltoniano original  $|\alpha\rangle$ . Esto se puede demostrar conjugando la Ec.(6) y proyectando sobre los autoestados  $|\alpha\rangle$ , obteniendo que:

$$E_\alpha \langle\beta|\alpha\rangle = \lambda_\beta^+ \langle\beta|\alpha\rangle. \quad (7)$$

Como el espectro de  $H$  es único, entonces  $E_\alpha = \lambda_\alpha^+$  para todo  $\alpha$ , lo cual implica necesariamente la condición de ortonormalidad:

$$\langle\beta|\alpha\rangle = \delta_{\beta\alpha}. \quad (8)$$

Entonces, los coeficientes  $C_\alpha$  se pueden hallar proyectando el estado inicial  $|\psi(t=0)\rangle$  sobre la autofunción  $\langle\beta|$ .

Como cualquier estado es una combinación lineal de ondas cuasi-estacionarias, éste debe ser también una onda o paquete de ondas. Estos paquetes se propagan ensanchándose debido a la naturaleza dispersiva del sistema, y disminuyendo su amplitud debido a las pérdidas que presenta. Mediante varias simulaciones computacionales en *Mathematica* en las que resolvimos exactamente la ecuación de Schrödinger utilizando como solución inicial tanto paquetes de onda como un estado en el que sólo estaba excitado un emisor, hemos comprobado que efectivamente esto sucede así.

### 3. Estudio del transporte en el estado estacionario

En la práctica interesa conocer cómo se propaga la excitación en el sistema cuando se inyecta energía al mismo. Para simular este fenómeno hemos modelizado la acción de un láser monocromático con frecuencia  $\omega_L$  sobre el sistema. La interacción entre el campo (clásico) creado por el láser  $\vec{E} = \vec{E}_0 \sin(\omega_L t)$  y el emisor sobre el que actúa es  $W(t) = -\vec{\mu} \cdot \vec{E}(t)$ , que en representación operacional se puede expresar como:

$$W(t) = \hbar\Omega_P \sin(\omega_L t) (\sigma_l + \sigma_l^\dagger), \quad (9)$$

donde  $\Omega_p = E_0 \langle 1|\mu|0\rangle / \hbar$  es la tasa de intercambio de energía asociada a la transición dipolar entre el estado fundamental  $|0\rangle$  y el excitado  $|1\rangle$  del emisor  $l$ . Para que esta interacción tenga forma diagonal hemos tenido que imponer simetría esférica sobre el sistema, de modo que las reglas de selección (regla de Laporte) obligan a que la transición entre el estado inicial y el final se deba dar entre estados de paridad opuesta.

El hamiltoniano que hay que resolver para obtener la evolución del sistema es:

$$H = H_0 + W(t), \quad (10)$$

donde  $H_0$  está dado por la Ec.(1). Resolvimos el hamiltoniano de forma numérica, pero como  $H_0$  es no hermítico (la probabilidad no se conserva), siempre se obtiene que el estado estacionario (para  $t \rightarrow \infty$ ) es el estado fundamental de cero excitaciones, a pesar de que el láser bombee energía al sistema.

Utilizando teoría de perturbaciones dependientes del tiempo se puede obtener un resultado de más clara interpretación física. Esto obliga tomar  $W(t) \ll H_0$ , lo cual es cierto siempre que  $\Omega_p \ll \omega_0$ . En la representación de Dirac, el operador de evolución temporal se puede aproximar en forma de serie mediante la llamada serie de Dyson [15], que a primer orden viene dado por la expresión:

$$U_D(t) \simeq 1 - \frac{i}{\hbar} \int_0^t e^{i\frac{H_0 t'}{\hbar}} W(t') e^{-i\frac{H_0 t'}{\hbar}} dt'; \quad (11)$$

de modo que cualquier estado (en la representación de Schrödinger) se puede obtener a partir de este operador como:

$$|\psi(t)\rangle = e^{-i\frac{H_0 t}{\hbar}} U_D(t) e^{i\frac{H_0 t}{\hbar}} |\psi(t=0)\rangle. \quad (12)$$

Despreciando términos no resonantes en  $\omega_L \simeq \omega_0$  y tomando como estado inicial el fundamental  $|0\rangle$ , el estado estacionario del sistema es:

$$|\psi(t \rightarrow \infty)\rangle \simeq |0\rangle + \frac{\Omega_p}{2} \frac{e^{-i(\omega_L t + \frac{\pi}{2})}}{(\frac{H_0}{\hbar} - \omega_L \mathbb{I})} \sigma_l^+ |0\rangle, \quad (13)$$

donde el láser actúa sobre el emisor  $l$ , y la matriz  $\mathbb{I}$  es la matriz identidad. La razón por la que este método aproximado aporta una interpretación física más realista que la que aporta la solución analítica es porque toma como estado estacionario del sistema el estado fundamental, y sobre él añade la contribución que realiza la corrección perturbativa  $W(t)$  para excitar al sistema descrito por  $H_0$ . De esta manera, se consigue separar en cierto modo la contribución que realiza  $H_0$  de  $W(t)$  sobre la evolución temporal del sistema. Dado que es un desarrollo en serie a primer orden, la función de onda no está normalizada.

Vamos a estudiar qué consecuencias tiene la frecuencia del láser sobre el transporte excitónico. Para ello, hemos resuelto mediante *Mathematica* la Ec.(13), invirtiendo numéricamente la matriz  $(\frac{H_0}{\hbar} - \omega_L \mathbb{I})$ . En la Fig.(2) se muestra el comportamiento estacionario de una cadena con  $N = 16$  emisores, cuando un láser actúa sobre el primer emisor de la misma. En la Fig.(2.a) se muestra la excitación del último emisor. Se observa que la probabilidad de excitación tiene 16 máximos o picos (los dos de los extremos son prácticamente inapreciables). Cuando se aumentan las pérdidas (Fig.(2.b)), los picos se ensanchan, superponiéndose los unos con los otros. En la Fig.(2.c) se muestran la relación de dispersión del sistema. Se observa que los máximos de las Fig.(2.a) y Fig.(2.b) coinciden justo con las frecuencias propias de la cadena. Además, en la Fig.(2.d) se muestra la probabilidad de excitación del último emisor correspondiente a los distintos modos propios. Se observa que el tamaño relativo entre máximos en la Fig.(2.a) es igual al tamaño relativo entre la excitación del mismo en los distintos modos propios. Esto demuestra que el láser excita un modo cuando su frecuencia entra en resonancia con una frecuencia propia del sistema. De ahí que haya  $N$  máximos, pues al haber  $N$  emisores, sólo hay  $N$  modos propios. Este fenómeno es similar al de las oscilaciones forzadas en una cuerda, en el que existen modos resonantes que coinciden con los modos propios de oscilación de la misma. Si se aumentan las pérdidas del sistema, la energía de cualquier estado excitado disminuye más rápidamente con el tiempo. Esto hace que los modos tengan una mayor anchura, superponiéndose en el estado estacionario, lo que obliga al láser a excitar más de uno, tal y como se observa en la la Fig.(2.b).

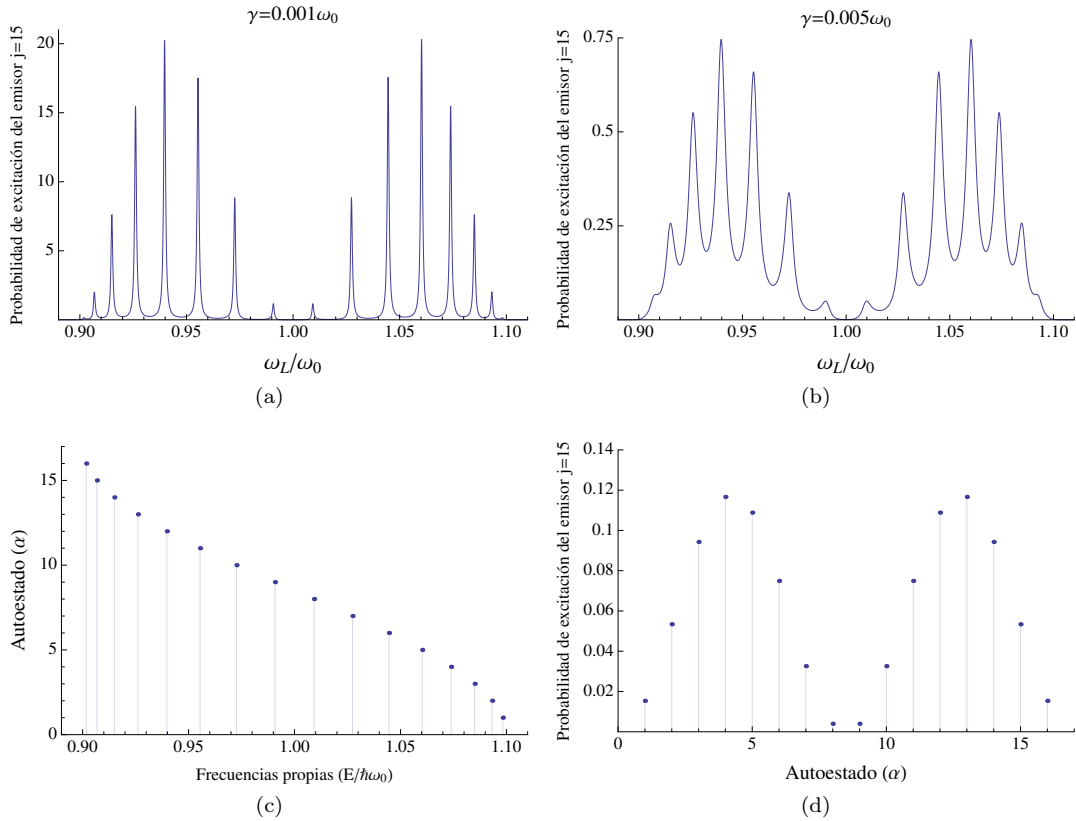


Figura 2: Transporte de excitones en un sistema con  $N = 16$  emisores en el estado estacionario. El láser actúa sobre el emisor  $j = 1$ , y se observa la probabilidad de excitación del emisor  $j = 15$ . Las características del sistema son  $J = 0,05\omega_0$ ,  $\gamma = 0,001\omega_0$  y  $\Omega_p = 0,05\omega_0$ . Se muestra: (a) Probabilidad en función de la frecuencia del láser; (b) Mismo evento pero aumentando las pérdidas a  $\gamma = 0,005\omega_0$ ; (c) Relación de dispersión (para ambos sistemas es la misma); (d) Probabilidad de excitación del emisor  $j = 15$  para cada modo normal  $\alpha$ . Los dos picos de los extremos son prácticamente inapreciables en (a) y en (b). La probabilidad no está normalizada.

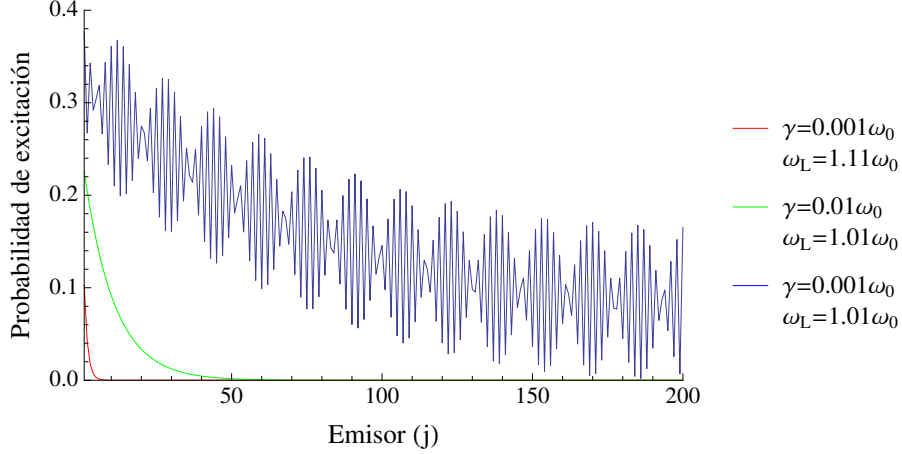


Figura 3: Transporte de excitones en un sistema con  $N = 200$  emisores en el estado estacionario. El láser actúa sobre el emisor  $j = 1$ . Se representa la probabilidad de excitación sin normalizar de cada emisor. Las características del sistema son  $J = 0,05\omega_0$  y  $\Omega_p = 0,05\omega_0$ . Se muestra: En rojo, cuando el láser no selecciona ningún modo  $\omega_L = 1,11\omega_0$ , pero presenta pocas pérdidas con  $\gamma = 0,001\omega_0$ ; En verde, cuando el láser selecciona el modo  $\omega_L = 1,01\omega_0$ , pero presenta grandes pérdidas con  $\gamma = 0,01\omega_0$ ; En azul, cuando el láser selecciona el modo  $\omega_L = 1,01\omega_0$ , y presenta pocas pérdidas con  $\gamma = 0,001\omega_0$ .

Vamos a analizar la eficiencia del transporte en este sistema. En la Fig.(3) se muestra la probabilidad de excitación de los emisores de una cadena cuando se bombea mediante un láser al primero. Se muestra el mismo fenómeno para distintos parámetros. Se observa que, o bien cuando el láser no selecciona ningún modo normal de la cadena (en rojo) con  $\omega_L = 1,11\omega_0$ , o bien cuando las pérdidas son significativas (en verde), del orden de  $0,01\omega_0$ , la probabilidad de que el último emisor esté excitado en el estado estacionario es cuasi-nula. Sólo si las pérdidas son bajas, del orden de  $0,001\omega_0$ , y el láser selecciona un modo normal (en azul) con  $\omega_L = 1,01\omega_0$ , la excitación consigue propagarse hasta el último emisor en el estado estacionario. Que bajo esta situación se observe que la probabilidad de excitación entre los emisores varía de forma ondulatoria es debido justamente a que el láser ha excitado un modo normal del sistema. Como ya hemos dicho en el apartado 2, las pérdidas debido a la excitación térmica del sistema real pueden ser del orden de  $0,01\omega_0$ , de modo que la eficiencia de la propagación en la práctica es realmente baja. Este fenómeno es el que motiva la siguiente parte del trabajo, en la que veremos que la eficiencia de la conducción se ve incrementada cuando se acopla la cadena con una microcavidad.

## 4. Microcavidades ópticas

Una cavidad óptica es un instrumento óptico que permite confinar la luz en un determinado volumen aprovechándose de fenómenos de reflexión. La luz confinada formará una onda estacionaria cuyas frecuencias propias dependerán de las características de la cavidad [12]. La forma más básica de cavidad resonante es el instrumento de Fabry-Perot, formado por dos espejos paralelos. Si se introduce luz en su interior, ésta se reflejará entre ambos formando ondas estacionarias cuyas frecuencias son un múltiplo entero de la frecuencia asociada a un determinado modo de resonancia, llamado modo de resonancia fundamental. La frecuencia de este es proporcional a la inversa de la distancia entre espejos. Variando la distancia entre los mismos se puede, por tanto, seleccionar los modos normales de la cavidad. Sin embargo, ningún espejo puede reflejar perfectamente la luz.

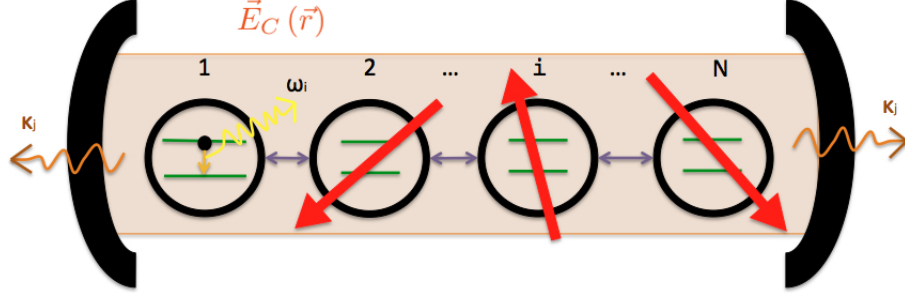


Figura 4: Representación esquemática del sistema físico: cristal unidimensional de emisores en el interior de una microcavidad resonante. Esta microcavidad confina un campo eléctrico  $\vec{E}_C$  en su interior que interactúa con los dipolos  $\vec{\mu}_j$  de los emisores a través de una interacción  $\hbar g_j = -\vec{\mu}_j \cdot \vec{E}_C$ . Dado que las paredes de la microcavidad no reflejan la luz perfectamente, parte de la energía escapa del interior, siendo  $\kappa_i/2$  la tasa de energía perdida.

Debido a esto, el Fabry-Perot (y en general cualquier cavidad) presenta pérdidas de energía. Otro tipo de cavidades más complejas son los cristales fotónicos [16], en los que la constante dieléctrica varía periódicamente, restringiendo el movimiento de los fotones; y las “whispering galleries” [12], que son estructuras típicamente esféricas en las que la luz se confina mediante el fenómeno de reflexión total interna.

Una microcavidad óptica es una cavidad óptica que confina la luz en pequeños volúmenes del orden de  $1 - 10 \mu\text{m}$ . Las ventajas que ofrece una microcavidad frente a una cavidad son que:

- Permiten discretizar el campo electromagnético, pudiendo controlar el número de fotones que se hallan en su interior. Esto obliga dar un tratamiento cuántico al campo confinado en las microcavidades.
- Presentan, en general, menores pérdidas de energía. Mientras que la energía perdida por unidad de tiempo en una cavidad óptica para un modo electromagnético situado en el rango óptico es del orden de  $10 \text{ meV}$ , en una microcavidad de tipo Fabry-Perot o de tipo cristal fotónico es del orden de los  $1 - 10^{-2} \text{ meV}$  [12]<sup>1</sup>, pudiendo llegar a ser incluso del orden de los  $10^{-2} - 10^{-5} \text{ meV}$  en microcavidades de tipo “whispering gallery”.
- Como veremos más adelante, permiten además crear un acoplo muy fuerte entre la radiación y la materia confinada en su interior.

Acoplando una microcavidad con el sistema se puede conseguir un acoplo entre los excitones y polaritones, que como veremos, crean un canal de propagación de energía más eficiente que el que hemos visto en el apartado anterior.

## 5. Acoplo del sistema con una microcavidad

### 5.1. Hamiltoniano del sistema y aproximaciones

En la Fig.(4) se representa de manera esquemática la configuración del sistema al introducir la cadena de emisores en una microcavidad. Los emisores pueden desexcitarse,

<sup>1</sup>En este artículo se presentan los datos en función de un parámetro óptico de calidad  $Q$ . La vida media asociada a un fotón en una cavidad se puede obtener a partir de este parámetro como  $\tau = \frac{Q}{2\pi\nu}$ , por construcción del mismo.



emitiendo un fotón con energía  $\hbar\omega_j$  que se propaga por la cavidad. Esta interacción está caracterizada por un parámetro de acoplo  $g_j(\vec{r}_i) = -\vec{\mu}_j \cdot \vec{E}_C/\hbar$ , que da una noción de la energía transferida por unidad de tiempo entre el dipolo  $\mu_i$  creado por el emisor que está en  $\vec{r}_i$  y el modo  $j$  del campo EM. En semiconductores [17], se ha conseguido que este acoplo sea del orden de 10 – 100 meV. Las pérdidas de energía de la microcavidad están caracterizadas por  $\hbar\frac{\kappa_j}{2}$ , donde  $\kappa_j$  es la tasa de disipación de energía asociada al modo de la cavidad  $j$ .

Hemos tomado como hamiltoniano para modelizar este sistema:

$$H = H_0 + H_{EM} + H_{int.}, \quad (14)$$

donde  $H_{EM}$  es el hamiltoniano asociado al campo electromagnético que ignora el término correspondiente a la energía del vacío:

$$H_{EM} = \sum_{j=\{\text{modos}\}} \hbar \left( \omega_j - i\frac{\kappa_j}{2} \right) a_j^\dagger a_j, \quad (15)$$

siendo  $a_j^\dagger$  y  $a_j$  los operadores de creación y destrucción bosónicos que actúan sobre el modo  $j$ ; y donde  $H_{int.}$  es el hamiltoniano de interacción:

$$H_{int.} = \sum_{i,j} \hbar g_j(\vec{r}_i) (a_j^\dagger + a_j) (\sigma_i^+ + \sigma_i), \quad (16)$$

que es equivalente a la Ec.(9), pero dando un tratamiento cuántico al campo electromagnético.

Para resolver este hamiltoniano, es decir, obtener sus autovalores y autovectores, realizamos tres simplificaciones con el objetivo de hacer más sencillo su estudio:

1. El único modo resonante que participa en la interacción con los emisores es el modo fundamental  $\omega_c$ . Así, todos los sumatorios en  $j$  desaparecen y  $\omega_j \equiv \omega_c$ .
2. Todos los emisores están igualmente acoplados con la cavidad, es decir que  $g(\vec{r}_i) \simeq cte. \equiv g$ .
3. Todos los términos del  $H_{int.}$  que no conservan la energía se desprecian<sup>2</sup>, de modo que:

$$H_{int.} \simeq \sum_j \hbar g (a^\dagger \sigma_j + a \sigma_j^\dagger). \quad (17)$$

## 5.2. Energías y autoestados del sistema con $\mathbf{J} = 0$ : Polaritones

Vamos a mostrar qué nuevos canales de propagación de energía introduce la cavidad. Para ello, tomamos sólo en este apartado que los emisores no están acoplados entre sí  $J = 0$ ; y por simplicidad, que el sistema no presenta ningún tipo de pérdidas  $\gamma = \kappa = 0$ . Bajo estas condiciones el hamiltoniano dado por la Ec.(14) tiene dos autoestados que llamamos polaritón superior e inferior, cuyas energías son:

$$E_\pm = \hbar \left( \Delta_\pm \pm \sqrt{\Delta_\pm^2 + Ng^2} \right); \quad (18)$$

donde  $N$  es el número de emisores de la cadena y  $\Delta_\pm \equiv \frac{\omega_0 \pm \omega_c}{2}$ ; y cuyas funciones de onda (sin normalizar) son:

<sup>2</sup>A esta aproximación se la suele llamar “Rotating Wave Aproximation” (RWA).

$$|\pm\rangle = |B\rangle + \left( -\frac{\Delta_-}{\sqrt{N}g} \pm \sqrt{\frac{\Delta_-^2}{Ng^2} + 1} \right) a^+ |0\rangle, \quad (19)$$

donde  $|B\rangle$  es un estado que definimos como:

$$|B\rangle \equiv \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{j=1}^N \sigma_j^+ |0\rangle. \quad (20)$$

En este estado  $|B\rangle$  todos los emisores tienen la misma amplitud de probabilidad, pero si el acoplo  $g$  fuese distinto para cada uno, este estado tendría una expresión mucho más compleja en el que cada emisor tendría una amplitud distinta. Todos los demás autoestados, que llamamos  $\{|D\rangle\}$ , están  $N - 1$  veces degenerados en energía con:

$$E_D = \hbar\omega_0. \quad (21)$$

Estos autoestados  $\{|D\rangle\}$  sólo involucran la excitación de los emisores, pues se puede demostrar que  $\langle D|a^+|0\rangle = 0$ , de modo que la luz no participa directamente en este canal de conducción. Debido a esto generalmente se les llama “Dark states”. Por otro lado, los autoestados  $|\pm\rangle$  involucran tanto la excitación del modo de la microcavidad como la de los emisores. Estos son los llamados polaritones (superior e inferior) en los que la luz sí participa directamente. Por ello al término  $|B\rangle$  que involucra a los emisores en dichos autoestados se le llama generalmente “Bright state”.

El polaritón es por tanto, en este contexto, una cuasi-partícula fruto del acoplo entre un fotón y un excitón. Su función de onda involucra un estado de excitación de los emisores, el “bright state”, en la que todos participan por igual, ya que sus constantes de acoplo con la cavidad son iguales. Las grandes diferencias entre las energías de los polaritones (Ec.(18)) y la relación de dispersión de los excitones (Ec.(3)), demuestran que ambas cuasi-partículas son de naturaleza muy distinta.

### 5.3. Regímenes de acoplo entre cavidad y emisores con $\mathbf{J} = 0$

Si se introduce energía en el sistema descrito en el anterior apartado (p.e. en forma de excitación), ésta oscilará entre la microcavidad y la cadena de emisores, de modo que la probabilidad de excitación en cada emisor también oscilará. La amplitud y frecuencia de esta oscilación, llamada oscilación de Rabi [18], dependerá de cómo sea el acoplo entre la microcavidad y la cadena de emisores. Como se puede ver en la Ec.(19), este acoplo depende de la proporción entre el parámetro  $\Delta_-$  y  $g\sqrt{N}$ . Si además se introducen pérdidas, la transmisión de energía entre microcavidad y cadena se verá mermada, de modo que los parámetros  $\gamma$  y  $\kappa$  también influyen sobre dicho acoplo.

Dado que queremos estudiar cómo se comporta la propagación de excitación a través de los autoestados que involucran a la microcavidad, interesa obtener una relación entre todos estos parámetros que permita saber bajo qué regímenes el sistema propaga la excitación de manera “eficiente”. En este contexto eficiente quiere decir que el sistema pierde energía a un ritmo más lento que las posibles oscilaciones de Rabi que se puedan observar entre microcavidad y emisores. Por ello, se dice que el sistema está en el régimen de acoplo fuerte cuando las bajas pérdidas permiten observar dichas oscilaciones, de modo que microcavidad y emisores intercambian energía de manera eficiente; mientras que se dice que está en el régimen de acoplo débil cuando las pérdidas impiden observar estas oscilaciones. En un sistema con dos niveles con energías  $E_+$  y  $E_-$ , el sistema presentará oscilaciones de Rabi siempre que  $Re(E_+) - Re(E_-) \neq 0$ , es decir, siempre que las energías de los dos niveles no estén degeneradas entre sí. Sin embargo, dado que las pérdidas del sistema introducen una vida media asociada con la parte imaginaria de las energías, estos

niveles de energía presentan una cierta anchura. Se necesita entonces que las energías de los dos niveles estén lo suficientemente lejos, energéticamente hablando, comparadas con las vidas medias de las mismas para que las oscilaciones de Rabi puedan ser observadas. Por ello se puede elegir:

$$\text{Re}(E_+) - \text{Re}(E_-) > \text{Im}(E_+) + \text{Im}(E_-), \quad (22)$$

como la condición para que el sistema esté en el régimen de acoplo fuerte. Dado que nos interesa estudiar los regímenes de acoplo entre los emisores y la microcavidad, hemos tomado que los emisores no están acoplados entre sí con  $J = 0$  para simplificar el análisis de este apartado. Resolviendo el hamiltoniano dado por la Ec.(14) se obtienen que las energías asociadas a los autoestados son:

$$\begin{cases} \text{Polaritones} \rightarrow & E_{\pm} = \hbar \left( \Delta_+ - i\delta_+ \pm \sqrt{(\Delta_- - i\delta_-)^2 + Ng^2} \right) \\ \text{Dark states} \rightarrow & E_D = \hbar \left( \omega_0 - i\frac{\gamma}{2} \right), \end{cases} \quad (23)$$

donde  $\delta_{\pm} \equiv \frac{\gamma \pm \kappa}{4}$ , y  $E_D$  está  $N - 1$  veces degenerada. Entonces, la condición de acoplo fuerte viene dada por la expresión:

$$Ng^2 + \Delta_-^2 > \delta_-^2 + \delta_+^2 \sqrt{1 + 4 \frac{\Delta_- \delta_-}{\delta_+^2}}. \quad (24)$$

Atendiendo a esta ecuación, una forma de llevar al sistema al régimen de acoplo fuerte sería que la microcavidad estuviese lejos de la resonancia con el emisor, comparado con algo que se asemeja a un promedio entre  $\gamma$  y  $\kappa$  corregido por el mismo parámetro  $\Delta_-$ . Sin embargo, este tipo de régimen da lugar a oscilaciones de Rabi muy pequeñas cuya frecuencia de oscilación es muy rápida. Éstas son, en la práctica, inobservables, de modo que tenemos que excluir esta condición también del régimen de acoplo fuerte: hay que incluir que la cavidad y los emisores estén cerca de la resonancia  $\omega_c \sim \omega_0$ . Otras posibles formas de que el sistema sí esté en acoplo fuerte son que, o bien el acoplo entre el emisor y la cavidad, o bien el número de emisores, sean muy grandes comparados con  $\gamma$  y  $\kappa$ . Este acoplo colectivo de los emisores con la cavidad hace que, aunque las pérdidas sean grandes, el sistema transporte excitación de manera eficiente siempre que se cumpla la desigualdad dada por la Ec.(24). En el siguiente apartado vamos a estudiar en profundidad qué efectos tiene sobre la conducción de excitones que el sistema esté en un régimen u otro.

#### 5.4. Estudio del transporte en el estado estacionario con la microcavidad

Queremos mostrar, por último, que la eficiencia del transporte de energía se ve incrementada al acoplar la cadena con una microcavidad. Para ello, tenemos que modelizar, al igual que en el apartado 3, la acción de un láser para poder introducir excitación al sistema. El hamiltoniano del sistema es entonces:

$$H = H_0 + H_{EM} + H_{int.} + W(t), \quad (25)$$

donde  $H_0$  está dado por la Ec.(1),  $H_{EM}$  por la Ec.(15) con un único modo  $\omega_c$ ,  $H_{int.}$  por la Ec.(17), y  $W(t)$  por la Ec.(9). Mediante *Mathematica* hemos resuelto numéricamente la Ec.(13), donde ahora  $H$  es este nuevo hamiltoniano sin el término perturbativo  $W(t)$ , con el objetivo de obtener la distribución de la excitación en el estado estacionario cuando el láser actúa sobre el primer emisor.

Para entender primero las características de un polaritón, en la Fig.(5) mostramos la probabilidad de excitación del último emisor de una cadena muy corta ( $N = 5$ ) cuando no

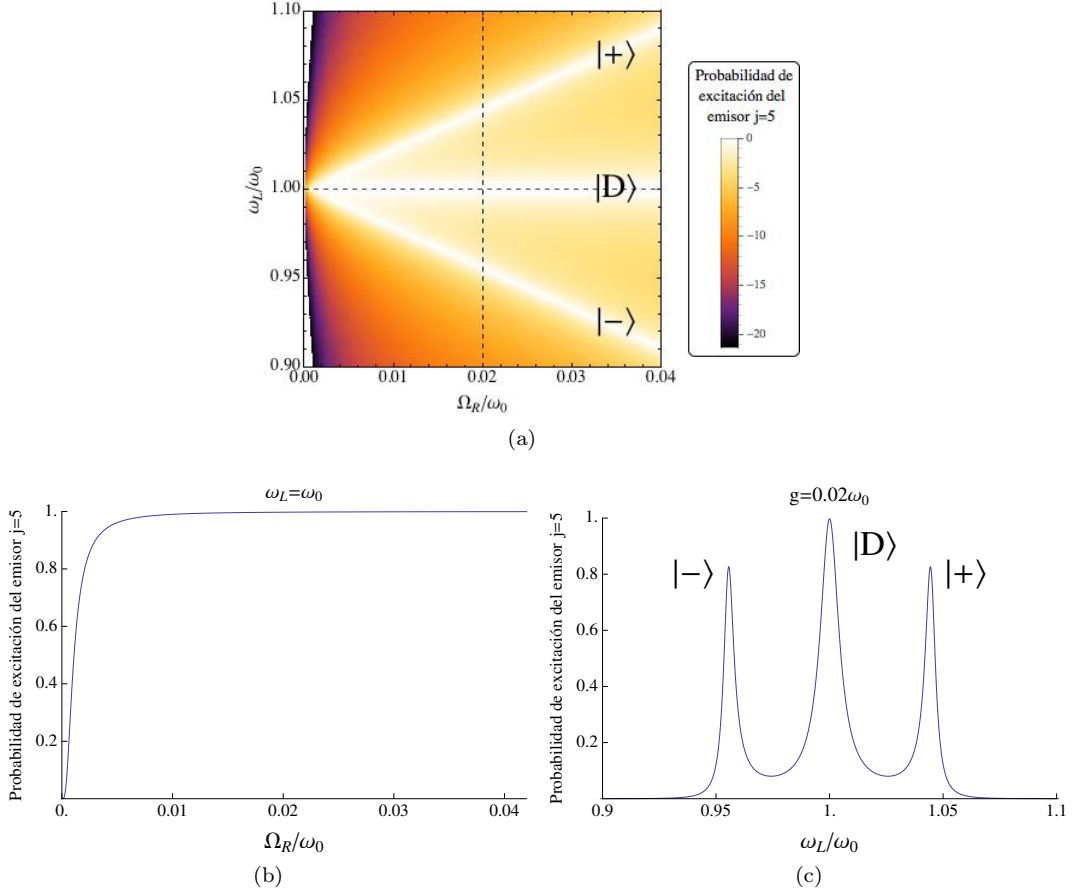


Figura 5: Transporte de excitación en el estado estacionario cuando se bombea el primer emisor de una cadena de  $N = 5$  emisores. El sistema está en el régimen de acoplo fuerte con  $J = 0$ ,  $\omega_c = \omega_0$ ,  $\gamma = 0,01\omega_0$ ,  $\kappa = 0,001\omega_0$  y  $\Omega_p = 0,05\omega_0$ . Se muestra: (a) Probabilidad de excitación del último emisor de la cadena en función de la frecuencia de Rabi  $\Omega_R = g\sqrt{N}$  y la frecuencia del láser  $\omega_L$ . Se presenta en escala logarítmica para apreciar mejor los cambios de la función. Se muestran en líneas punteadas los cortes: (b)  $\omega_L = \omega_0$ ; (c)  $\Omega_R = 0,01\omega_0$ . La probabilidad no está normalizada. Se muestran en las gráficas (a) y (c) qué máximos corresponden a qué autoestados  $|+\rangle$ ,  $|-\rangle$  y  $|D\rangle$  del sistema.

hay acoplo entre emisores  $J = 0$  y el modo de la cavidad  $\omega_c = \omega_0$ . Un número tan pequeño de emisores permite observar con claridad qué le sucede a cada modo normal de la cadena (pues sólo hay  $N$ ) al acoplar los emisores con la cavidad. En la Fig.(5.a) se representa su probabilidad de excitación en escala logarítmica, frente a la frecuencia del láser  $\omega_L$  y la frecuencia de Rabi, definida como  $\Omega_R = g\sqrt{N}$ . En líneas discontinuas se ilustra cuáles son los cortes mostrados en las Fig.(5.b) y Fig.(5.c). En la Fig.(5.a) se observa que existen tres máximos de probabilidad para todo  $g \neq 0$ . Las frecuencias de dos de ellos ( $|+\rangle$  y  $|-\rangle$ ) varían linealmente con en el acoplo; mientras el otro máximo ( $|D\rangle$ ) no lo hace. Cuando  $g \rightarrow 0$  los tres máximos coinciden en  $\omega_L = \omega_0$ , pero en  $g = 0$  (ver Fig.(5.b)) desaparecen, ya que la probabilidad de excitación es nula. Estos tres máximos corresponden a las tres frecuencias propias del sistema: los polaritones superior  $|+\rangle$  e inferior  $|-\rangle$  dados por la Ec.(23), y los autoestados degenerados en energía correspondientes a los “dark states”  $|D\rangle$ . Así, y a pesar de que los autoestados de los “dark states” sean distintos entre sí, el láser excita a todos a la vez debido a dicha degeneración en energía. Como los “dark states” no involucran al modo de la cavidad, sus frecuencias propias no cambian con el acoplo. Los polaritones sin embargo sí que cambian debido a su naturaleza mixta entre excitón y fotón. Cuando  $g = 0$  la cavidad no está acoplada con los emisores, de modo que la excitación no se puede propagar. Se observa además en la Fig.(5.c) que los máximos presentan una cierta anchura debido tanto a las pérdidas de los emisores como a las pérdidas de la cavidad. Como las pérdidas de energía de los emisores son mayores que las de la cavidad, el máximo de probabilidad de los “dark states” es más ancho que el de los polaritones.

Para comprender qué consecuencias tiene que la cavidad y los emisores no estén en resonancia, en la Fig.(6.a) se muestra un sistema similar cuando el modo de la cavidad  $\omega_c \neq \omega_0$ . Se observa que se ha abierto un “gap” entre las energías propias de los dos polaritones  $|+\rangle$  y  $|-\rangle$ , pues ahora en  $g \rightarrow 0$  los dos máximos de probabilidad de los polaritones no coinciden. Sin embargo, en los “dark states”  $|D\rangle$  no ha cambiado nada debido, nuevamente, a que no involucran al modo de la cavidad. Atendiendo a la Ec.(23), se ve que, efectivamente, fuera de la resonancia entre la cavidad y los emisores se debe abrir un “gap” entre los polaritones. La diferencia entre las pérdidas  $\gamma - \kappa$  también debería hacerlo, pero es siempre inapreciable: los efectos de aumentar cualquiera de los dos parámetros esconde los efectos de dicho “gap” debido a que los máximos de los polaritones y/o “dark states” se ensanchan, fruto del aumento de las pérdidas, llegando a superponerse. Esto ilustra que no es necesario que la cavidad y los emisores estén en resonancia para que se pueda excitar el modo propio de un polaritón. Es más, si las pérdidas del sistema son grandes y la constante de acoplo de la cavidad es pequeña, es más fácil excitar el modo de un polaritón fuera de la resonancia debido a que éste está más alejado energéticamente del resto de modos.

Cuando cavidad y emisores están en resonancia ( $\omega_c = \omega_0$ ) y se introduce acoplo entre emisores con  $J \neq 0$  (ver Fig.(6.b)), se observan  $N = 5$  máximos para  $g \rightarrow 0$ ; mientras que para altas constantes de acoplo se observan  $N + 1$  máximos, de los cuales sólo las frecuencias propias de  $N - 1$  se comportan de manera constante con la constante de acoplo, y dos varían linealmente con dicha constante. Que para altas  $g$  haya  $N + 1$  máximos es debido a que el láser excita las  $N + 1$  frecuencias propias del sistema: los  $N - 1$  “dark states” que ahora no están degenerados debido al acoplo  $J$ ; y los dos polaritones. Nuevamente, sólo las frecuencias propias de éstos varían con  $g$  debido a que son los únicos autoestados que involucran a la cavidad. Cuando  $g = 0$ , la cavidad y los emisores no están acoplados, de modo que el sistema se comporta como se describió en la sección 2. De ahí que haya sólo  $N$  máximos. Según se aumenta la constante de acoplo, aparece un polaritón en  $\omega_0$  cuya frecuencia propia disminuye linealmente con el acoplo  $g$ , interfiriendo con autoestados de tipo “dark state” cuyas frecuencias propias no varían; mientras que el otro polaritón evoluciona desde el primer modo de la cadena  $\omega_0 + 2J$ , haciendo que

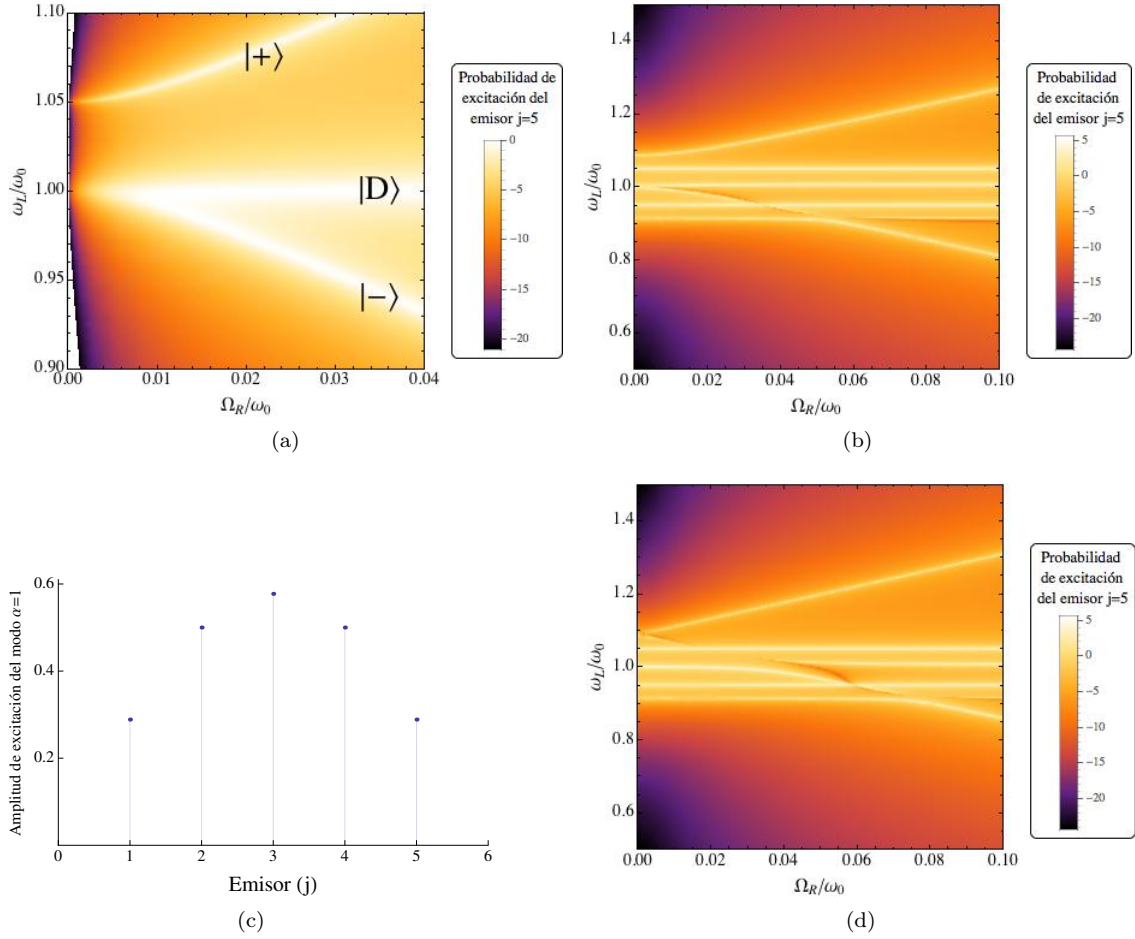


Figura 6: Transporte de excitación en el estado estacionario cuando se bombea el primer emisor de una cadena de  $N = 5$  emisores. El sistema está en el régimen de acoplo fuerte con  $\kappa = 0,001\omega_0$  y  $\Omega_p = 0,05\omega_0$ . Se muestra la probabilidad de excitación del último emisor de la cadena en función de la frecuencia de Rabi  $\Omega_R = g\sqrt{N}$  y la frecuencia del láser  $\omega_L$ , cuando: (a)  $J = 0$ ,  $\omega_c = 1,05\omega_0$  y  $\gamma = 0,01\omega_0$ ; (b)  $J = 0,05\omega_0$ ,  $\omega_c = \omega_0$  y  $\gamma = 0,001\omega_0$ ; (c) Función de onda del primer modo propio del sistema sin cavidad y con  $J = 0,05\omega_0$ ; (d)  $J = 0,05\omega_0$ ,  $\omega_c = \omega_0 + 2J$  y  $\gamma = 0,001\omega_0$ . La probabilidad, que no está normalizada, se presenta en escala logarítmica para apreciar mejor los cambios de la función. Nótese los cambios de escala entre las distintas gráficas. Se muestra en la gráfica (a) qué máximos corresponden a qué autoestados  $|+\rangle$ ,  $|-\rangle$  y  $|D\rangle$  del sistema.

éste deje de comportarse como un estado de tipo “dark state” para comportarse como un polaritón, aumentando linealmente su frecuencia propia con la constante de acoplo. La solución al hamiltoniano que describe a este sistema (dado por la Ec.(25) sin el término perturbativo) es:

$$E_{\pm} \simeq \hbar \left( \Delta_+ + J - i\delta_+ \pm \sqrt{(\Delta_- + J - i\delta_-)^2 + Ng^2} \right). \quad (26)$$

La única diferencia entre esta relación de dispersión y la dada por el Ec.(23) para los polaritones, es que  $\omega_0 \rightarrow \omega_0 + 2J$ . Esto implica que los polaritones se han acoplado con el primer modo de la cadena de emisores. La función de onda de este modo es la que se muestra en la Fig.(6.c). Como se puede observar, esta función es la más semejante a la de un estado de tipo “bright state”, donde todos los emisores tienen la misma amplitud de probabilidad de estar excitados.

La Ec.(26) también justifica que, aunque  $\omega_c = \omega_0$ , existe un “gap” entre los polaritones, introducido por la constante de acoplo  $J$ . La condición para que este “gap” no exista es ahora que  $\omega_c = \omega_0 + 2J$ . Es decir: cavidad y cadena están en resonancia cuando el modo de la cavidad coincide con el primer modo de la cadena, que es el modo al que eligen acoplarse los polaritones. Este fenómeno se puede observar en la Fig.(6.d), donde se muestra el mismo sistema pero ahora en la condición de resonancia  $\omega_c = \omega_0 + 2J$ . El “gap” entre los polaritones ha desaparecido, apareciendo ambos en  $g = 0$  en el primer modo de la cadena de emisores  $\omega_0 + 2J$ . Nótese que si cada emisor tuviera una constante de acoplo con la cavidad distinta, el “bright state” sería distinto al dado por la Ec.(20). Bajo esta situación, realizando varias simulaciones en *Mathematica* hemos observado que los polaritones ya no tienen porqué elegir sólo al primer autoestado de la cadena para acoplarse, pues éste no tiene porqué parecerse al “bright state”. Sin embargo, estos resultados no los presentamos aquí, pues no introducen ninguna mejora cualitativa en la eficiencia del transporte.

Por último, vamos a estudiar la eficiencia del transporte cuando el número  $N$  de emisores es mucho mayor que el número de emisores por los que necesita propagarse un excitón para que su energía prácticamente se disipe. Como el máximo de su velocidad de propagación  $v_g = \frac{1}{\hbar} \frac{dE}{dk}$  en el medio que hemos modelizado es del orden de  $0,1 - 1$  emisor/fs, y su vida media, tal y como obtuvimos en el apartado 2, es del orden de  $100 - 10$  fs, entonces el número de emisores por los que consigue propagarse un excitón antes de que se disipe la mitad (por definición de vida media) de su energía es del orden de 10 emisores. Como la disipación sigue una ley exponencial, la energía será prácticamente despreciable tras el doble de emisores. Por ello, hemos escogido estudiar un sistema con  $N = 200$  emisores. En la Fig.(7) se muestra la probabilidad de excitación del sistema descrito por el hamiltoniano de la Ec.(25) en función de la frecuencia del láser cuando se bombea excitación al primer emisor. En la Fig.(7.a) se muestra la probabilidad de excitación del segundo emisor de la cadena cuando cadena y cavidad se encuentran en el régimen de acoplo débil. Se observa un máximo central en  $\omega_0$ . Si se observa la excitación de un emisor más alejado del primero (véase Fig.(7.b)), en  $j = 25$ , se ve que la probabilidad ha disminuido muchos órdenes de magnitud, y la anchura del máximo ha aumentado. Sin embargo, si se observa al mismo emisor en el régimen de acoplo fuerte (Fig.(7.c)), se comprueba que su probabilidad de excitación es muchos órdenes de magnitud mayor. Además, se observa un pico bien definido entre  $0,9\omega_0$  y  $1,1\omega_0$ , estando el máximo en  $\omega_0$ . Se pueden observar también dos máximos mucho más pequeños en  $0,76\omega_0$  y  $1,34\omega_0$ . Si se determina cual es la probabilidad de excitación del emisor  $j = 60$  (ver Fig.(7.d)) en el régimen de acoplo fuerte, se observa que el máximo central ha disminuido dos órdenes de magnitud, mientras que los dos máximos  $|+\rangle$  y  $|-\rangle$  de los extremos permanecen inalterados. Se observan oscilaciones en la probabilidad del máximo central además. Por último, en la Fig.(7.e) se muestra la probabilidad de excitación del último emisor de la cadena, el  $j = 200$ . Se observa que el máximo central ha desaparecido, mientras que los máximos  $|+\rangle$  y  $|-\rangle$  de los extremos

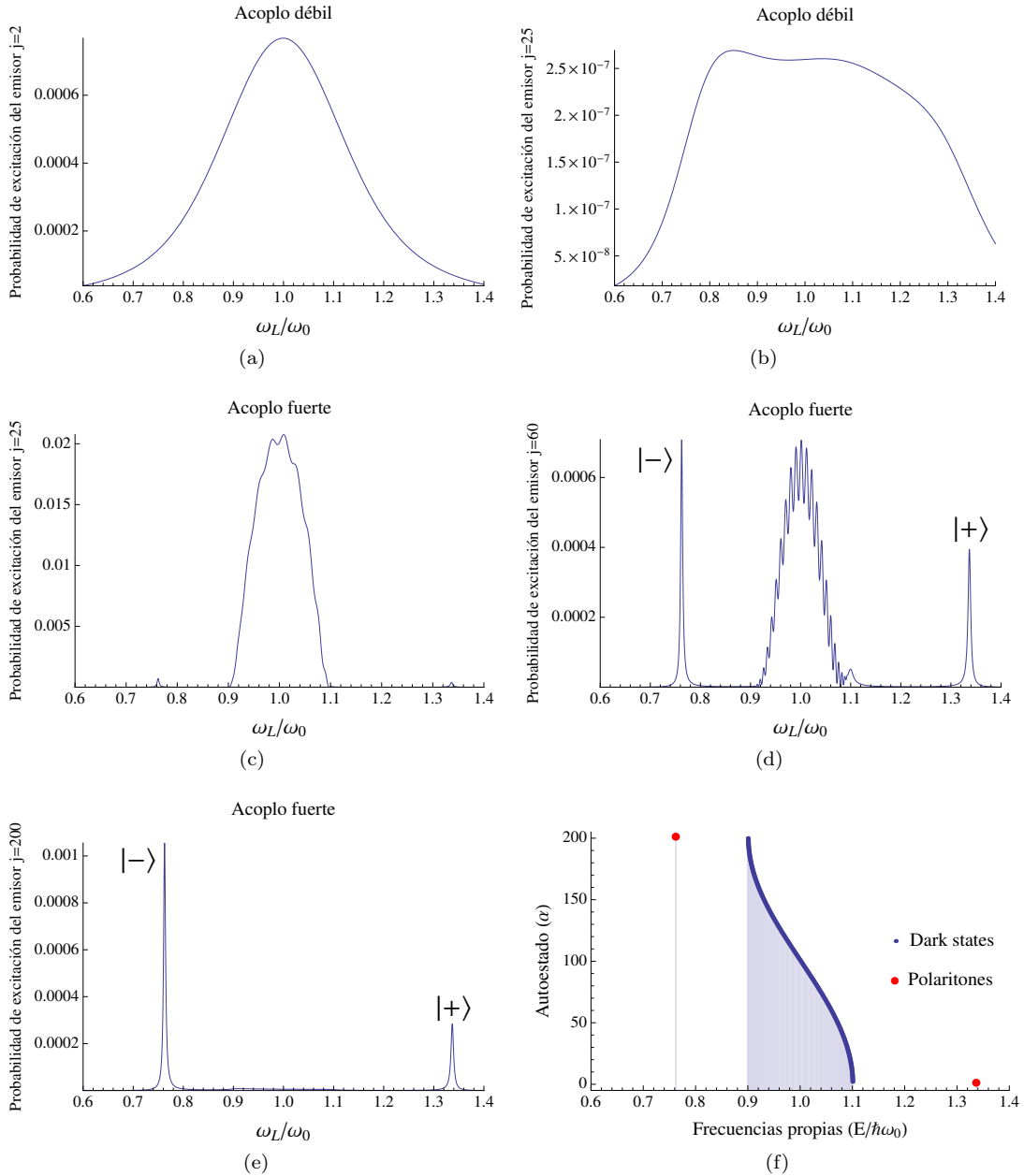


Figura 7: Transporte de excitación en el estado estacionario a lo largo de una cadena con  $N = 100$  emisores cuando se bombea mediante un láser al primer emisor. Las condiciones del sistema son  $\omega_c = \omega_0$ ,  $J = 0,05\omega_0$ ,  $\Omega_p = 0,05\omega_0$  y  $g = 0,02\omega_0$ . Se muestra en función de la frecuencia del láser la probabilidad (sin normalizar) de excitación del emisor: (a)  $j = 2$  en el régimen de acoplo débil con  $\gamma = 0,4\omega_0$  y  $\kappa = 0,1\omega_0$ ; (b)  $j = 25$  en el régimen de acoplo débil; (c)  $j = 25$  en el régimen de acoplo fuerte con  $\gamma = 0,01\omega_0$ , y  $\kappa = 0,001\omega_0$ ; (d)  $j = 60$  en el régimen de acoplo fuerte; (e)  $j = 200$  en el régimen de acoplo débil; (f) Relación de dispersión de la cadena (en azul) y energías propias de los polaritones (en rojo). Nótese los cambios de escala en el eje de abscisas entre las distintas gráficas. Se muestra en las gráficas (d) y (e) qué máximos corresponden a qué autoestados  $|+\rangle$  y  $|-\rangle$  del sistema.



permanecen en el mismo orden de magnitud.

Para entender todos estos fenómenos se representa en la Fig.(7.f) las frecuencias propias del sistema. Los dos máximos extremos que se observan en el régimen de acoplo fuerte corresponden a las frecuencias propias de los polaritones  $|+\rangle$  y  $|-\rangle$ ; mientras que el máximo central entre  $0,9\omega_0$  y  $1,1\omega_0$  corresponde a las frecuencias propias de los modos de tipo “dark states”, en los que la luz no participa directamente. Que en el acoplo débil el láser no sea capaz de excitar el modo de los polaritones es debido a que no se transmite de manera eficiente energía entre emisores y cavidad, tal y como ya hemos explicado. Como las pérdidas son muy grandes, la anchura asociada a todas las frecuencias propias es muy grande, de modo que no se puede distinguir ningún modo propio. Bajo este régimen, entonces, la forma de propagación más eficiente es a través de la cadena (“dark states”), canal que en el apartado 3 demostramos que era poco eficiente, y que aquí se vuelve a reflejar en la Fig.(7.b), donde se observa que la excitación del sistema es casi nula. Sin embargo, en el régimen de acoplo fuerte este fenómeno se puede paliar. Los dos canales que crean los polaritones, reflejados en los máximos  $|+\rangle$  y  $|-\rangle$  de los extremos de las Fig.(7.c), Fig.(7.d) y Fig.(7.e), ofrecen una transmisión de la excitación que no decae con la lejanía entre los emisores; mientras que el canal de los “dark states” dado por el máximo central, sí lo hace. Este éxito es debido a que, en los polaritones, la excitación no se propaga a través de la cadena, la cual presenta grandes pérdidas. En vez de ello, la excitación puede viajar a través de la cavidad hasta el último emisor sin que éstas le afecten demasiado.

## 6. Conclusiones

En este trabajo hemos estudiado el transporte excitónico a través de una cadena unidimensional de emisores acoplados. Hemos observado que el transporte es muy ineficiente cuando esta cadena está aislada. Sin embargo, si se acopla con una microcavidad óptica aparecen otros canales de conducción: el dado por los del tipo “dark states”, cuyo comportamiento es muy similar al que se tenía en el sistema aislado; y los dados por los polaritones. Estos transportan energía ayudándose del modo de la microcavidad, permitiendo que la excitación de un emisor pueda ser transportado hasta otro sin pasar a través del resto. Hemos descubierto que este tipo de transporte es mucho más eficiente debido a las bajas pérdidas que presenta la microcavidad. Sin embargo, y para que esto suceda así, el sistema y la microcavidad deben cumplir unas ciertas características: deben estar en el régimen de acoplo fuerte.

Los polaritones en este contexto pueden suponer un impulso importante para la industria electrónica y energética, tanto para mejorar la eficiencia del transporte de las células orgánicas fotovoltaicas, pudiendo suplir la ingente demanda de energías renovables; como para el desarrollo de diversos dispositivos electrónicos que se aprovechan de fenómenos de transporte excitónico, tales como los transistores excitónicos [19].

## Agradecimientos

Agradezco a mis tutores J. Feist y E. Moreno la dedicación y el tiempo que han invertido en mí a lo largo de la elaboración de este TFG; así como elogiar la gran labor pedagógica que han realizado.

## Referencias

- [1] *Energy Consumption Industry Profile: Global*. MarketLine 0199-2808, 1-39 (2014).

- [2] H. K. V. Lotsch, A. Goetzberger and V. U. Hoffman. *Photovoltaic Solar Energy Generation*. Springer (2005).
- [3] U. S. Energy Information Administration (2015). *Levelized Cost and Levelized Avoided Cost of New Generation Resources in the Annual Energy Outlook 2015*.
- [4] International Energy Agency (2015). *Projected Costs of Generating Electricity*.
- [5] C. J. Brabec. *Organic photovoltaics: technology and market*. Solar Energy Materials & Solar Cells **83**, 273-292 (2004).
- [6] M. B. Askari. *Introduction to Organic Solar Cells*. Sustainable Energy **2**(3), 85-90 (2014).
- [7] B. A. Gregg. *Excitonic Solar Cells*. J. Phys. Chem. B **107**(20), 4688-4698 (2003).
- [8] G. D. Scholes and G. Rumbles. *Excitons in nanoscale systems*. Nature **5**, 683-696 (2006).
- [9] G. D. Scholes, G. R. Fleming, A. Olaya-Castro, and R. van Grondelle. *Lessons from nature about solar light harvesting*. Nature Chemistry **3**, 763-774 (2011).
- [10] S. K. Saikin, A. Eisfeld, S. Valleau and A. Apuru-Guzik. *Photonics meets excitonics: natural and artificial molecular aggregates*. Nanophotonics **2**(1), 21-38 (2013).
- [11] F. Fassioi, R. Dinshaw, P. C. Arpin and G. D. Scholes. *Photosynthetic light harvesting: excitons and coherence*. J. R. Soc. Interface **11** (2013).
- [12] K. J. Vahala. *Optical microcavities*. Nature **424**, 836-846 (2003).
- [13] V. Timofeev and D. Sanvitto. *Exciton Polaritons in Microcavities*. Springer **172** (2012).
- [14] F. H. M. Faisal, and J. V. Moloney. *Time-dependent theory of non-Hermitian Schrödinger equation: application to multiphoton-induced ionisation decay of atoms*. J. Phys. B: At. Mol. Phys. **14**, 3603-3620 (1981).
- [15] J. J. Sakurai and J. Napolitano. *Modern Quantum Mechanics, Second edition, Chapter 5*. Addison-Wesley (1992).
- [16] J. Vuckovic, M. Loncar, H. Mabuchi and A. Scherer. *Design of photonic crystal microcavities for cavity QED*. Phys. Rev. E **65** (2001).
- [17] J. P. Reithmaier, G. Sek, A. Löffler, C. Hofmann, S. Kuhn, S. Reitzenstein, L. V. Keldysh, V. D. Kulakovskii, T. L. Reinecke and A. Forchel. *Strong coupling in a single quantum dot-semiconductor microcavity system*. Nature **432**, 197-200 (2004).
- [18] G. S. Agarwal. *Vacuum-field Rabi oscillations of atoms in a cavity*. J. Opt. Soc. Am. B **2**,3 (1985).
- [19] Y. Y. Kuznetsova, M. Remeika, A. A. High, A. T. Hammack, L. V. Butov, M. Hanson, and A. C. Gossard. *All-Optical Excitonic Switch*. Science **321**, 229 (2008).