

Polaryzacja to cecha światła, która określa kierunek drgań pola elektromagnetycznego w trakcie propagacji światła. W spolaryzowanym liniowo świetle pole elektryczne oscyluje w płaszczyźnie określonej względem kierunku rozchodzenia się światła. Na co dzień zjawisko to wykorzystuje się w okularach polaryzacyjnych, które dzięki filtrowi polaryzacyjnemu blokują światło spolaryzowane na skutek odbicia od różnych powierzchni. Pod koniec pierwszej połowy XIX wieku Jean-Baptiste Biot zauważył, że roztwór kwasu winowego może obrócić płaszczyznę drgań spolaryzowanego światła rozchodzącego się w roztworze. Przypisał on tę obserwację temu, że molekuly kwasu winowego mogą występować w dwóch formach, które nie są swoimi odbiciami lustrzanymi. Ten fakt potwierdził Ludwik Pasteur obserwując, że każda z tych form skręca płaszczyznę światła w innym kierunku, zaś ich mieszanina nie wykazywała efektu skręcania polaryzacji. Taki efekt nazwano aktywnością optyczną, zaś obiekt, który nie jest identyczny ze swoim odbiciem lustrzanym nazwano chiralnym.

Chiralność jest cechą wielu molekuł o znaczeniu biologicznym np. aminokwasów i cukrów. Rozróżnianie między enancjomerami (molekułami o różnych skrętnościach) ma zasadnicze znaczenie w medycynie, gdzie jeden z enancjomerów może być lekiem, zaś drugi, w najgorszym wypadku, trucizną. Niezwykły postęp w dziedzinie nanotechnologii pozwolił na wytwarzanie sztucznych struktur o właściwościach chiralnych. Takie struktury można stosować do kształtowania polaryzacji światła, optycznego rozróżniania między enancjomerami, wykorzystania momentu pędu światła do manipulacji obiektami w nanoskali, a także do eksperymentalnego studiowania optyki obiektów chiralnych.

Celem niniejszego projektu jest teoretyczna analiza właściwości optycznych nanostruktur chiralnych umieszczonych w ośrodkach planarnych. Ośrodek planarny to każdy ośrodek złożony z warstw. Taki ośrodek mogą stanowić np. podłoże, na którym umieszczone są nanostruktury oraz powietrze czy para zwiereciadeł między, którymi znajduje się nanostruktura. W praktyce, niemal zawsze, nanostruktura jest umieszczona w ośrodku planarnym, co nie pozostaje bez wpływu na jej właściwości optyczne. Światło odbite, np. od podłoża może być wielokrotnie odbijane przez nanostrukturę. Ten efekt można wykorzystać do wzmocnienia pola elektrycznego czy też zmiany widma (barwy). Nowatorską cechą projektu jest to, że do tej pory efekty optyczne związane z chiralnością były zazwyczaj analizowane teoretycznie bez uwzględnienia ośrodka planarnego. Należy jednak zwrócić uwagę na to, że ośrodek planarny ma istotny wpływ na polaryzację światła rozpraszanego lub absorbowanego przez nanostrukturę, a w skrajnym przypadku może być czynnikiem decydującym o tym, że achiralna struktura staje się aktywna optycznie po umieszczeniu w ośrodku planarnym poprzez złamanie symetrii.

W trakcie projektu opracowane zostaną nowe metody symulacji elektromagnetycznych takich nanostruktur. Duży nacisk położony zostanie na to, aby z jednej strony możliwe było symulowanie struktur złożonych z wielu nanocząstek o dowolnie skomplikowanym kształcie (uzyskanie chiralności wymaga złamania symetrii), tak jak ma to miejsce w eksperymentalnych próbkach, zaś z drugiej strony, aby opracowana technika pozwalała na sformułowanie ogólnych reguł dotyczących aktywności optycznej nanostruktur umieszczonych w ośrodkach planarnych.

W ramach projektu zbadane zostaną nanostruktury, których źródłem aktywności optycznej jest ich własna chiralność lub te, które choć same są achiralne wykazują aktywność optyczną ze względu na to, że w ich pobliżu umieszczone są biomolekuly aktywne optycznie. Ten drugi przypadek ma szczególne znaczenie praktyczne. Aktywność optyczna biomolekuł jest na ogół mała w porównaniu z absorpcją światła przez biomolekuly. Czyni to optyczne odróżnianie enancjomerów utrudnionym. Celem wykorzystania nanostruktur jest wzmocnienie efektów związanych z chiralnością w taki sposób, aby za pośrednictwem światła możliwe było odróżnianie enancjomerów. Dzięki temu, że wytworzone w ramach projektu narzędzia pozwalają na badanie właściwości optycznych złożonych nanostruktur w ośrodkach planarnych, zaproponowane zostaną reguły pomagające w projektowaniu nanostruktur wzmacniających aktywność optyczną biomolekuł. Jednym z celów projektu jest zbadanie, w jaki sposób czynniki takie jak rodzaj ośrodka planarnego i nanocząstek oraz rozmieszczenie przestrzenne nanocząstek oraz biomolekuł wpływają na uzyskane wzmocnienie. Ponadto, zbadana zostanie możliwość wykorzystania nanostruktur do jednoczesnej detekcji składu i chiralności biomolekuł.

Niniejszy projekt poszerzy istotnie wiedzę na temat tego, jak światło oddziałuje z nanostrukturami chiralnymi, a także jak obecność ośrodka planarnego wpływa na to oddziaływanie. Ze względu na to, że analiza aktywności optycznych w projekcie uwzględnia cechy wytwarzanych eksperymentalnie nanostruktur, uzyskane wyniki badań oraz narzędzia obliczeniowe będą miały praktyczne znaczenie dla projektowania i modelowania nanostruktur wykorzystujących efekty związane z aktywnością optyczną.