

Metale, a zwłaszcza nanocząstki metaliczne znane są z przejawiania tzw. rezonansu plazmonowego, tj. wzbudzenia kolektywnych drgań cieczy elektronowej wewnątrz i na powierzchni nanocząstki, o określonej częstotliwości pod wpływem zewnętrznego dynamicznego pola elektromagnetycznego. Częstotliwości własne tych drgań są zależne od rozmiaru, kształtu oraz rodzaju materiału, z którego wykonana jest cząstka. Natomiast, w przypadku rozciągniętych powierzchni, np. na granicy metalu i dielektryka, wzbudzone są biegnące, nielokalizowane quazicząstki nazywane plazmono-polarytonami. Podobne wzbudzenia mogą powstawać w strukturach porowatych przy czym z uwagi na ich skomplikowaną ale rozciągniętą powierzchnię wzbudzone są zarówno plazmony zlokalizowane jak i biegnące nielokalizowane plazmono-polarytony. Wzbudzenia plazmonowe powodują, że materiały te wykazują intrygujące właściwości optyczne, m.in. zdolność do silnego lokalnego wzmacniania pola elektromagnetycznego. Dzięki temu mają wiele potencjalnych zastosowań m.in. w budowie czujników, jako podłoża do powierzchniowo wzmocnionej spektroskopii Ramanowskiej, przy budowie wysoko wydajnych źródeł światła białego o rozmiarach rzędu kilkuset nanometrów czy też jako katalizatory. W ostatnich latach nastąpił szybki rozwój metod wytwarzania materiałów nano-porowatych, dzięki czemu obecnie rozmiar i gęstość porów może być kontrolowana. W szczególności wyprodukowane zostały materiały z porami o rozmiarach rzędu od kilku do kilkunastu nanometrów. Materiały te są szczególnie interesujące z uwagi na to, że zgodnie z obserwacjami eksperymentalnymi w przypadku jednorodnych nanocząstek metalicznych, w skali tej, mikroskopowe efekty związane z dynamiką cieczy elektronowej w istotny sposób zmieniają ich makroskopowe właściwości optyczne. Wewnętrzna nano-struktura porów, w materiale metalicznym lub metaliczno-dielektrycznym, może więc nie tylko w znacznym stopniu wpływać na jego właściwości optyczne, ale też powodować, że będą one bardziej wrażliwe na efekty mikroskopowe związane z dynamiką cieczy elektronowej. Wśród tych ostatnich można wymienić odpychające oddziaływanie Kulombowskie między elektronami, tzw. efekt spill-out, czyli wylewanie się cieczy elektronowej poza granicę metalu czy też tunelowanie elektronów. Efekty te wybiegają poza standardowy opis stosowany w ramach elektrodynamiki klasycznej. Celem projektu jest zbadanie zależności pomiędzy geometrią i rozmiarem wewnętrznej struktury nanoporowatych materiałów metalicznych i metaliczno-dielektrycznych a ich podstawowymi właściwościami optycznymi. Planowane jest zbadanie, czy i w jakim stopniu mikroskopowa dynamika cieczy elektronowej przejawia się w makroskopowych właściwościach optycznych tych materiałów. Przeanalizowane zostaną m.in. właściwości takie jak widma rozpraszania, absorpcji światła, gęstość, rozkład i rozmiar obszarów silnie wzmocnionego pola elektromagnetycznego (tzw. ang. "hot spots").

W ramach projektu opracowane zostaną modele numeryczne nano-porowatych materiałów różniących się wewnętrzną geometrią struktury porów, tj. średnim rozmiarem, stopniem porowatości oraz rozkładem porów. Do opisu układów posłużą metoda elementów skończonych (MES) oraz teoria funkcjonału gęstości. Stosowalność metody MES, standardowo używanej do rozwiązywania układu równań Maxwella (w układach klasycznych), zostanie rozszerzona i obejmie opis efektów kwantowych istotnych w nanoskopowej skali porów. Przewidywania modeli numerycznych zostaną uzupełnione i zweryfikowane pomiarami wytworzonych struktur plazmonicznych.

Integracja opisu efektów kwantowych w modelu MES pozwoli na wyznaczenie właściwości optycznych układów o rozmiarach dochodzących do kilkuset nanometrów. Skala ta znacznie wykracza poza obecne możliwości obliczeniowe modeli kwantowych opartych na teorii funkcjonału gęstości wynoszących maksymalnie kilka nanometrów.

W dalszej części projektu, model numeryczny posłuży do optymalizacji struktur pod kątem rozkładu i intensywności lokalnego wzmocnienia pola elektromagnetycznego oraz poszukiwania nowych funkcjonalności np. stworzenie materiału wrażliwego na polaryzację padającego światła (poprzez manipulację ułożeniem porów). W zależności od wyników obliczeń numerycznych planujemy pracować nad wytworzeniem struktur o najbardziej obiecujących właściwościach. W szczególności, planujemy wytworzyć struktury zoptymalizowane pod kątem siły wzmocnienia pola elektromagnetycznego i zbadać ich możliwości do wzmocnienia sygnału Ramanowskiego lub/i fluoresencji od wybranych molekuł. Zbadamy też potencjał tych struktur jako platformy nanonępek optycznych wzmacniających siłę oddziaływania z molekułami.

Dokładne i systematyczne badania nad zależnością pomiędzy wewnętrzną geometrią materiałów porowatych a ich właściwościami optycznymi pozwolą uzyskać nową wiedzę na ich temat, co z uwagi na ich szerokie zastosowania może w znacznym stopniu wpłynąć na kierunki przyszłych badań w tej dziedzinie. W szczególności znalezienie globalnych parametrów geometrycznych związanych z makroskopowymi właściwościami materiału może przyczynić się do wyznaczenia kierunków dla skutecznego wytwarzania nowych materiałów z myślą o konkretnych zastosowaniach. Wiedza ta, przyczyni się do rozwoju metod symulacji warstw porowatych, które często stanowią jedną z części większego układu.