

Proposition de stage de Master M1 année 2016-2017

Structure en couches électroniques dans les agrégats

Laboratoire : Institut Lumière Matière (UMR5306 CNRS / Univ Lyon 1)

Domaine scientifique de la Doua
Université Claude Bernard Lyon 1 (Bât. Kastler)
10 rue Ada Byron
69622 Villeurbanne Cedex

Contacts : Franck Rabilloud, Romain Schira
Mail : franck.rabilloud@univ-lyon1.fr
Tel : 04 72 43 29 31

Les particules de la taille du nanomètre constituées de quelques dizaines à quelques centaines d'atomes sont communément appelées agrégats. Leurs propriétés varient de manière critique en fonction du nombre d'atomes. En particulier, les agrégats correspondant à des nombres précis d'atomes, par exemple $n = 8, 20, 40, 58, 92$, etc. pour les métaux simples, sont nettement plus stables que les autres tailles. Cette stabilité particulière a été expliquée par le modèle semi-empirique du « jellium » qui considère les électrons de valence comme des particules indépendantes uniformément réparties dans le volume de l'agrégat et soumis à un potentiel effectif simple. Les électrons de valence sont alors organisés en couches électroniques selon un remplissage similaire à celui d'un atome. Par exemple, le remplissage pour l'argent est du type $1S^2 1P^6 1D^{10} 2S^2 1F^{14} 2P^6 1G^{18}$ etc (voir figure). Les agrégats les plus stables sont ceux pour lesquels le nombre d'électrons correspond à un remplissage en couches pleines ($n = 18, 20, 40, 58$, etc.) ; on parle de nombres magiques.

Durant le stage, nous proposons de faire des calculs allant au-delà de l'approximation « Jellium ». Nous utiliserons la méthode DFT (théorie de la fonctionnelle de la densité) pour résoudre l'équation de Schrödinger dans une approche entièrement quantique traitant tous les électrons de manière (quasi-)exacte. Nous devrions être capable d'identifier le remplissage en couches électroniques, de retrouver les nombres magiques et de tracer les orbitales occupées par les électrons.

L'étudiant devra être intéressé par le domaine des nanosciences, des simulations numériques et calculs sur ordinateur, et avoir des connaissances de bases en physique atomique et physique quantique. Un goût pour la programmation serait un plus.

