

## Proposition de stage de Master M2 année 2017-2018

### Modélisation quantique de la réponse plasmonique d'agrégats métalliques

**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 propriétés optiques des nanoparticules métalliques varient fortement avec la taille des nanoparticules. Par exemple les spectres optiques des petits agrégats sont composés de transitions discrètes et localisées associées à des niveaux d'énergie quantifiés, alors que ceux des particules au-delà du nm ( $\sim 100$  atomes) sont caractérisés par une résonance plasmon intense et large. Les propriétés des nanoparticules varient aussi avec la forme de la nanoparticule ou encore avec son environnement.

A ce jour, les descriptions théoriques des propriétés optiques des nanoparticules reposent sur des approches semi-classiques valables uniquement pour des nanoparticules de  $\sim 10$  nm ou plus. Pour les particules plus petites les effets quantiques doivent être pris en compte.

Le but du stage sera d'étudier théoriquement dans une approche entièrement quantique les propriétés spectroscopiques d'absorption ou de fluorescence de nanoparticules métalliques. L'étude théorique se fera dans le cadre de la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT et Time-Dependent DFT). L'étudiant calculera la réponse optique de diverses nanoparticules métalliques et étudiera la position et l'intensité du plasmon en fonction de divers paramètres comme la composition chimique, la forme géométrique ou l'environnement.

Ce stage pourra faire l'objet d'une suite en thèse sur la modélisation des propriétés plasmoniques des nanoparticules métalliques pour le photovoltaïque ou sur la réponse optique de systèmes hétérogènes nanoparticules métalliques – molécules organiques.

