

Proposition de stage de Master M2 année 2016-2017

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

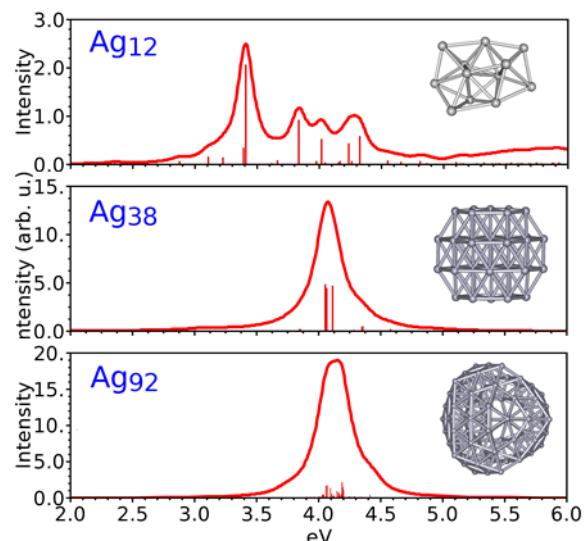
Tel : 04 72 43 29 31

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 de quelques nm de diamètre (au-delà de quelques dizaines à quelques centaines d'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 ~ 10 nm ou plus. Pour les particules plus petites les méthodes quantiques doivent être utilisées.

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 et la forme géométrique.

Ce stage pourra faire l'objet d'une suite en thèse sur la modélisation des propriétés plasmoniques des nanoparticules métalliques pour le photovoltaïque.



Absorption optique de type moléculaire pour Ag_{12} , et de type plasmonique pour Ag_{38} et Ag_{92} .