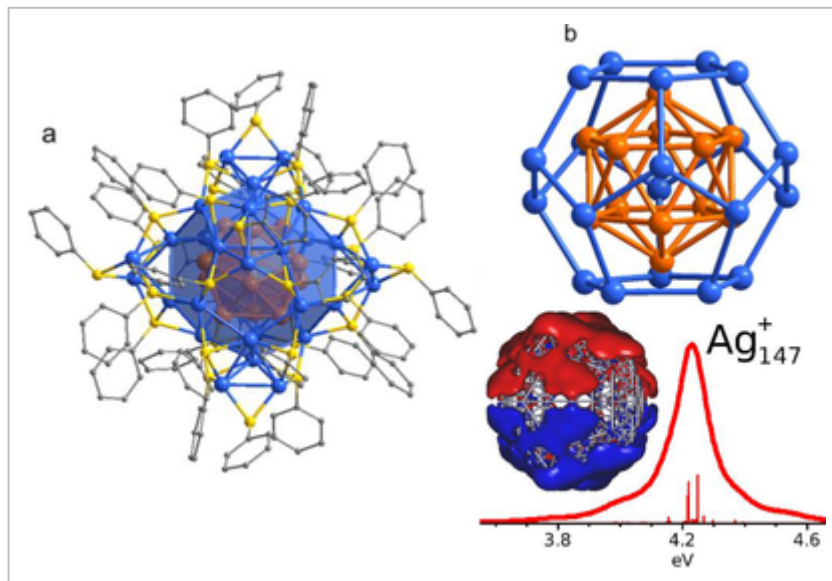


MODÉLISATION DE LA RÉPONSE OPTIQUE DE NANOPARTICULES MÉTALLIQUES

LABORATORY : Institut Lumière Matière
LEVEL : M1 / M2
TEAM(S) : THEOCHEM
CONTACT(S) : RABILLOUD Franck
CONTACT(S) DETAILS: franck.rabilloud[at]univ-lyon1.fr / Tel. 0472432931
KEYWORD(S) : nanoparticule / simulation / Plasmon

SCIENTIFIC CONTEXT :

Les propriétés optiques des nanoparticules métalliques sont marquées par un phénomène de résonance plasmon qui les rend particulièrement intéressantes pour de nombreuses applications en optoélectronique, photonique, imagerie médicale, etc. Ces propriétés varient avec certaines caractéristiques intrinsèques à la nanoparticule - taille, morphologie, composition chimique - et aussi en fonction de facteurs externes comme la température ou l'environnement.



Fabriquées par voie physique, les nanoparticules sont conservées dans des matrices inertes. Fabriquées par voie chimique, elles sont stabilisées par des ligands greffés en surface. La prise en compte de ces environnements requiert une modélisation quantique du système complet. Cette dernière doit être capable de décrire à la fois le métal et les liaisons et transferts de charge avec le voisinage. Cela constitue un véritable challenge au niveau théorique. Mais une modélisation est absolument nécessaire pour interpréter les données expérimentales obtenue récemment sur des particules de ~ 1 nm.

MISSIONS :

Le but du stage sera de prédire la réponse optique (absorption, fluorescence) de petites nanoparticules métalliques ou bimétalliques. Plusieurs travaux seront possibles (à choisir selon l'intérêt du stagiaire) : (i) Mesurer la qualité des prédictions en fonction des paramètres du modèle quantique, (ii) traiter et analyser les résultats déjà obtenus sur un grand nombre d'agrégats, (iii) prédire la réponse optique d'agrégats stabilisés par des ligands.

L'étude théorique se fera dans le cadre de la théorie de la fonctionnelle de la densité. Les simulations seront effectuées sur les puissants ordinateurs des centres locaux et nationaux.

Le stage pourra se dérouler soit à l'automne 2024 soit au printemps 2025.

OUTLOOKS :

Découverte de la simulation numérique avec des méthodes quantiques.

BIBLIOGRAPHY :

See <https://sites.google.com/site/franckrabiloud/>