

CARACTÉRISATION DES PROPRIÉTÉS ÉLECTRONIQUES DE GRAPHÈNE/NANOPARTICULES PAR DES APPROCHES THÉORIQUES

LABORATORY : Institut Lumière Matière
IN COOPERATION WITH Institut Lumière Matière
:

LEVEL : M2
TEAM(S) : THEOCHEM
SPECTROBIO

CONTACT(S) : ANTOINE Rodolphe
MIGNON Pierre

CONTACT(S) DETAILS: rodolphe.antoine[at]univ-lyon1.fr / Tel. 0472431085
pierre.mignon[at]univ-lyon1.fr / Tel. 0472448314

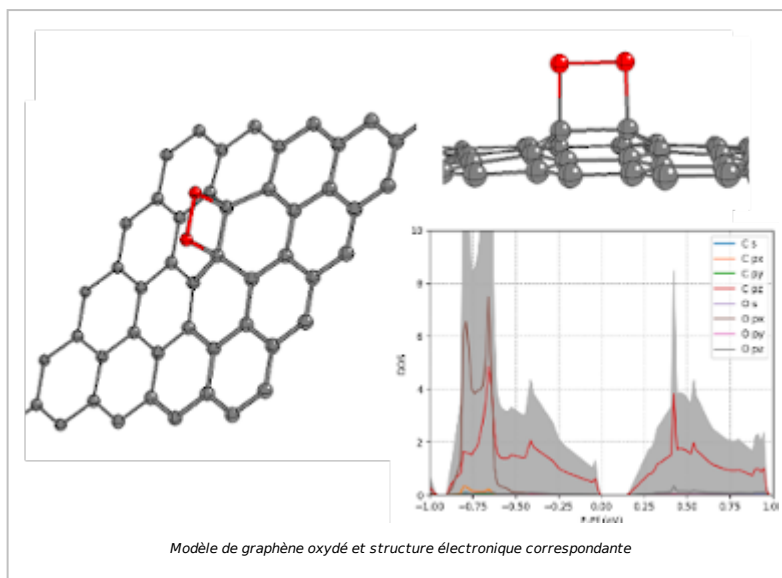
KEYWORD(S) : Graphène et oxyde de graphène / propriétés électroniques / calculs DFT

SCIENTIFIC CONTEXT :

Depuis l'isolation du graphène en 2004, l'intérêt pour les matériaux 2D ne cesse de croître avec le développement de nouveaux matériaux hybrides apportant de nouvelles propriétés. Récemment, des nanoparticules d'or déjà connues pour leurs caractéristiques optiques, électriques et catalytiques ont été greffées sur des oxydes de graphène en vue de développer de nouveaux matériaux ayant potentiellement des applications dans le stockage d'énergie, l'optoélectronique, les biocapteurs ... [1]

Les matériaux hybrides 2D/nanoparticules actuellement synthétisés

au laboratoire dans l'équipe Spectrométries des Biomolécules et Agrégats avec des collaborateurs indiens amènent de nombreuses questions sur le mode de greffage de nanoparticules sur la surface oxydée du graphène : interaction électrostatiques et/ou orbitales (orbitales d du métal et le nuage pi du graphène). Des analyses menées au laboratoires permettent de donner quelques réponses sur la structure/composition et les propriétés optiques de ces matériaux. Afin de confirmer/infirmier les hypothèses sur le type d'interactions entrant en jeu il est nécessaire de réaliser des calculs numériques précis de la structure électronique de ces matériaux et de les confronter aux données expérimentales.



MISSIONS :

Ce stage consistera à caractériser, par calculs DFT (Théorie de la Fonctionnelle de la Densité) périodiques à ondes planes via le logiciel VASP, la structure géométrique et électronique de nanoparticules de petites taille de métal sur un feuillet de graphène. On s'intéressera dans un premier temps aux propriétés électroniques de feuillets modèles de graphène avec différents degrés d'oxydation (peroxyde, carbonyl, hydroxyles, carboxyles) par analyse des différentes contributions aux structures de bandes et densités des états. On poursuivra ensuite le travail de modélisation par des calculs de très hauts niveaux des propriétés (i) optiques et (ii) de couplage avec les nanoclusters.

OUTLOOKS :

possibilité de poursuite sur un travail de thèse (bourse ED PHAST).

BIBLIOGRAPHY :

Nancy, P.; Nair, A.; Antoine, R.; Thomas, S.; Kalarikkal, N. In Situ Decoration of Gold Nanoparticles on Graphene Oxide via Nanosecond Laser Ablation for Remarkable Chemical Sensing and Catalysis. *Nanomaterials* 2019, 9(9), 1201; <https://doi.org/10.3390/nano9091201>