
Modélisation quantique des propriétés optiques de nanoparticules d'argent et argent-thiols aryles

Benjamin Bousquet¹, Mohamed Cherif¹, Kunqiang Huang¹, and Franck Rabilloud^{*†1}

¹Institut Lumière Matière – Université de Lyon, CNRS : UMR5306 – France

Résumé

Les propriétés optiques des nanoparticules d'argent sont caractérisées par une bande d'absorption unique, large et très intense appelée plasmon. Ce régime est décrit depuis longtemps et avec succès de manière classique (Théorie de Mie) ou semi-classiques par des excitations collectives des électrons s de valence.

Ces dernières années, plusieurs groupes [1-5] ont simulé les spectres d'absorption de petits agrégats d'argent dans le cadre de la TDDFT (Time-Dependent Density-Functional Theory). Ces calculs ont fortement surestimé le rôle des électrons d et ont fourni une interprétation du plasmon en désaccord avec la théorie classique. Nous montrerons que l'utilisation de fonctionnelles à séparation de portée (Range-Separated Hybrid (RSH) functionals) permet de retrouver l'interprétation classique du plasmon s de valence [6].

Récemment, des particules d'argent de 1.3 nm de diamètre recouvertes de thiols aryles ont été synthétisées en solution. Il a été montré que la résonance plasmon à 450 nm disparaît avec l'adsorption progressive de ligands pour laisser apparaître un spectre presque de type moléculaire avec plusieurs bandes bien distinctes à plus basse énergie [7]. Nous présenterons une étude théorique de l'évolution des propriétés optiques en fonction du taux de thiols aryles greffés, qui permet d'interpréter le passage d'un régime de type plasmon vers un régime de type moléculaire.

Références:

M. Harb et al, J. Chem. Phys. **129**, 194108 (2008).

K. Baisha et al., Phys. Rev. B **78**, 075439 (2008).

C. Aikens et al., J. Phys. Chem. C **112**, 11272 (2008).

H.C. Weissker et al., Phys. Rev. B **84**, 165443 (2011).

G. Barcaro et al., J. Phys. Chem. C **115**, 24085 (2011).

F. Rabilloud, J. Phys. Chem. A **177**, 4267 (2013). F. Rabilloud, J. Chem. Phys., sous

*Intervenant

†Auteur correspondant: franck.rabilloud@univ-lyon1.fr

presse.

O. M. Bakr et al., *Angew. Chem. Int. Ed.* **48**, 5921 (2009).

Mots-Clés: TDDFT, nanoparticules, agrégats, nanoparticles, silver clusters