
Modélisation multi-échelle des propriétés optiques de systèmes hybrides nanoparticule/photochrome: de la TD-DFT au couplage Mécanique Quantique/Electrodynamique

Arnaud Fihey*^{†1}, Aurélie Perrier¹, and François Maurel¹

¹Interfaces, Traitements, Organisation et Dynamique des Systèmes (ITODYS) – CNRS : UMR7086, Université Paris VII - Paris Diderot – Université Paris Diderot, Bâtiment Lavoisier, 15 rue Jean de Baïf, case postale 7090, 75205 Paris Cedex 13, France

Résumé

L’immobilisation de composés photochromes sur des nanoparticules métalliques et le contrôle de leur propriétés électroniques constitue un élément essentiel dans le design de nouveaux dispositifs photoactifs à l’échelle nanométrique.

Cependant, la modélisation des propriétés optiques de systèmes comportant une molécule photoactive immobilisée sur un agrégat métallique reste aujourd’hui un challenge en raison de la taille du système hybride et du nombre considérable d’électrons (plusieurs milliers) à traiter.

Dans cette présentation seront discutées les propriétés optiques de systèmes Nanoparticule d’or/Photochrome obtenues à l’aide d’un modèle réductionniste (où seulement quelques atomes métalliques sont considérés) et d’une méthode TD-DFT “standard”. Puis les différents schémas de calculs hybrides en cours de développement seront détaillés. Tout d’abord, le développement des paramètres d’interaction or-organique dans le cadre d’une méthode DFT tight-binding (DFTB) apporte des informations sur la conformation et la structure électronique de systèmes de taille nanométrique, et permet de passer de la modélisation de la molécule à celle du matériau. Dans un second temps, nous nous intéresserons à une méthode QM/ED (Electrodynamics) pour accéder au couplage entre la résonance plasmon de la Nanoparticule et l’excitation moléculaire.

Mots-Clés: photochromisme, Nanoparticule, TD, DFT, Plasmonique, Electrodynamique

*Intervenant

[†]Auteur correspondant: arnaud.fihey@etu.univ-paris-diderot.fr