

# DYNOPT

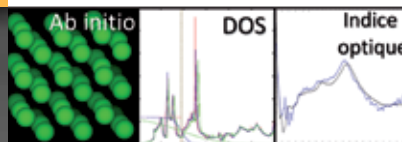
Simulation de la dynamique des propriétés optiques des matériaux irradiés par impulsions laser ultrabrèves

BUDGET	170 K€
MONTANT AIDE OBTENUE	85 K€
INVESTISSEMENT D'AVENIR LABEX	2012 - 2014

## LE PROJET

Après irradiation de matériaux solides avec des intensités laser modérées, de l'ordre de  $10^{13}$ - $10^{14}$  W/cm<sup>2</sup>, des cavités ou des structures alignées périodiquement appelées « ripples » sont observées en surface. Le contrôle des procédés de structuration nécessite de maîtriser les excitations mises en jeu, notamment la quantité d'énergie absorbée ainsi que l'excitation des plasmons en surface du matériau. Les objectifs du projet consistent à caractériser l'évolution des propriétés optiques hors d'équilibre définissant la quantité d'énergie déposée (ablation directe) dans le matériau ainsi que la réponse plasmonique (rides en surface). Les indices optiques seront déterminés à partir de calculs de conductivité électrique ab initio issus de simulations de dynamiques moléculaires réalisées avec le code Abinit. A terme, la dépendance des indices optiques en température électronique serviront de base de données pour décrire les propriétés optiques transitoires du matériau excité et ainsi pouvoir adapter les caractéristiques de l'excitation laser à la réponse du matériau (probing).

**ViaMéca**  
Pôle de compétitivité mécanique



### PORTEUR DE PROJET

LABEX Manutech Sise  
Université de Lyon

Dr Jean-Philippe COLOMBIER  
Jean.Philippe.Colombier@univ-st-etienne.fr

Caserne Sergent Blandan,  
37, rue du Repos  
69361 LYON CEDEX 07  
www.universite-lyon.fr

## OBJECTIFS ET ENJEUX

Les propriétés optiques du matériau sous irradiation laser seront déterminées en fonction du désordre thermique engendré. Les propriétés optiques pour une température électronique différente de la température des ions nécessitent un grand nombre d'atomes (environ 10<sup>8</sup> pour une structure typique FCC) et il est nécessaire d'introduire beaucoup d'états électroniques dans les calculs ab initio sachant que chaque calcul représente environ 6000h/cpus. Ainsi 100,000h sont nécessaires par matériau afin de pouvoir en déduire des lois d'évolution (envisagés pour Ni, Cu, Ti, W, Inox). Le code « Abinit » développé par le CEA/DIF sera utilisé. 350 000h de calcul parallèles ont été obtenus par l'intermédiaire d'un projet GENCI en 2013. Les résultats attendus consistent en une base de données des propriétés optiques et une plage de paramètres d'irradiation pour qu'un matériau puisse devenir plasmoniquement actif à température élevée.

## PHASES DU PROJET

- 1: Calcul des densités d'états des électrons (Au, Cu, Al, Ni, Ti, W, Inox) à différentes températures électroniques (Te) pour déterminer l'évolution de la structure électronique en fonction de l'excitation laser
- 2: Détermination d'un nombre d'électrons libres en fonction de Te utilisables pour le calcul des propriétés de transport (optique, thermique, mécanique)
- 3: Peut-on produire une activation plasmonique sur le W à 800 nm, expliquant la formation de ripples en surface (plasmonic switching)
- 4: Modification des transitions optiques et donc des indices lors de l'excitation laser ultracourte
- 5: Interprétation des périodicités des nanostructures périodiques
- 6: Construction d'une base de données optiques accessible via intranet/internet

## PRINCIPAUX DÉLIVRABLES

Pour 7 matériaux environ (Au, Cu, Al, Ni, Ti, W, Inox) une base de données accessible sera constituée en fonction de la température électronique :

- Densité d'états électroniques et potentiel chimique
- Nombre d'électrons libres et capacité électronique
- Indices optiques complexes et période des plasmons de surface.

De plus, ponctuellement pour certains matériaux/fréquences laser :

- Interprétation d'expériences d'irradiations sur métaux, notamment formation de ripples
- Activation plasmonique.

