INSTITUT DE MINERALOGIE, DE PHYSIQUE DES MATERIAUX ET DE COSMOCHIMIE

Unité Mixte de Recherche 7590
Code 115, 4 Place Jussieu F-75252 Paris CEDEX 05

SÉMINAIRE
Lundi 24 mars, 14 h

Salle de Conférence, 4ème étage, Tour 22-23, Salle 1
IMPMC, Université P. et M. Curie, 4, Place Jussieu, 75005 Paris

ELENA CANNUCCIA

Institut Laue Langevin, 6 Jules Horowitz, Grenoble

EFFETS DE LA TEMPERATURE SUR LES PROPRIETES ELECTRONIQUES ET OPTIQUES DES SOLIDES: UNE APPROCHE AB-INITIO

Il y a plusieurs années, Heine, Allen et Cardona ont souligné que le couplage électron-phonon peut induire des corrections aux états électroniques aussi grandes que celles induites par la corrélation électronique.
Le calcul des effets induits par le couplage électron-phonon dans les matériaux réels reste une tâche extrêmement difficile, malgré le développement de ressources de calcul plus puissantes et efficaces. Par conséquence la majorité des simulations ab-initio des propriétés électroniques et optiques d'une large classe de matériaux est réalisée avec les ions dans leurs positions d'équilibre en un réseau cristallin.
Dans ce séminaire, je présente une approche ab-initio basée sur la théorie perturbative en termes de déplacements ioniques. Cette approche nous a permis de calculer les effets de la température sur les propriétés électroniques et optiques de différents systèmes. Je porterai aussi l'attention sur la dynamique de point zéro des ions, comment elle affecte le gap électronique de matériaux.

Tel**: 33-(0)1 44 27 42 20** --Fax**: 33-(0)1 44 27 44 69** –
Courriel**: catherine.dreyfus@impmc.jussieu.fr**