



SOUTENANCE DE THESE

Iurii TIMROV

Mercredi 27 mars 2013 à 14h

Amphi Gaspard Monge

Étude *ab initio* des plasmons et du couplage électron-phonon dans le bismuth: de la modélisation de l'absorption des porteurs libres à une nouvelle méthode pour le calcul de spectre de perte d'énergie électronique

Résumé: Ce travail a été consacré à l'étude théorique du bismuth semi-métallique à l'aide de méthodes basées sur la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT). Les effets de couplage spin-orbite et d'échange et de corrélation dans l'approximation de densité locale (LDA) et de gradient généralisé (GGA) ont été approfondis de façon systématique. J'ai trouvé que les poches d'électrons et de trous au niveau de Fermi sont correctement décrites, ce qui m'a permis d'interpréter avec succès les expériences pompe-sonde dans le bismuth photoexcité menées au laboratoire des Solides Irradiés. Le calcul du couplage électron-phonon a montré la forte dépendance, par rapport au vecteur d'onde électronique, du couplage de la bande de valence la plus haute avec le phonon A_{1g} LO de centre de zone, ce qui explique l'observation de la forte dépendance en k de l'amplitude d'oscillation de l'énergie de liaison de cette même bande en photoémission résolue en temps. J'ai aussi montré que la présence d'extréma dans les bandes de valence et de conduction, où la masse des porteurs peut atteindre $18 \cdot m_0$, favorise une accumulation des porteurs et conduit à une augmentation de leur fréquence plasma au cours du temps après photoexcitation, un effet qui n'a pas (encore) été observé dans d'autres matériaux. Enfin, j'ai développé une nouvelle méthode en théorie de perturbation de la fonctionnelle de la densité dépendante du temps (TDDFPT), qui permet de calculer la réponse électronique du matériau pour n'importe quelle valeur du moment transféré. Cette approche basée sur la méthode de récursion de Lanczos m'a permis de calculer les spectres de perte d'énergie électronique de Bi dans la gamme d'énergie 0-100 eV et de combler l'intervalle d'énergie entre les pertes des électrons de valence et celles des électrons de cœur. Cette méthode ouvre des perspectives considérables, comme le calcul des plasmons de surface.

Mercredi 27 mars 2013 à 14h

Amphi Gaspard Monge, École Polytechnique, 91128 Palaiseau