



INSTITUT DE MINÉRALOGIE, DE PHYSIQUE DES MATÉRIAUX 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 température sur les propriétés électroniques 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 la corrélation électronique.

Le calcul des effets induits par le couplage électron-phonon dans les matériaux réels reste une tâche extrêmement difficile. Par conséquent la majorité des simulations *ab-initio* des propriétés électroniques et optiques des matériaux est réalisée avec les ions à leur position d'équilibre dans le réseau cristallin.

Dans ce séminaire, je présenterai une approche *ab-initio* basée sur la théorie des perturbations en fonction des déplacements ioniques. Cette approche nous a permis de calculer les effets de la température sur les propriétés électroniques et optiques de différents systèmes. Je discuterai aussi la dynamique de point zéro des ions, et la façon dont elle affecte le gap électronique des matériaux.