

# Le couplage électron-phonon dans les matériaux à base de carbone

Théorie et Simulation Numérique des Propriétés Électroniques, Institut Néel, CNRS, Grenoble

**Responsables projet** : C. Attaccalite, X. Blase, V. Olevano, C. Faber

**Moyens GENCI** : VARGAS

*Le couplage électron-phonon joue un rôle important sur le transport électronique, notamment comme source de diffusion des électrons dans les métaux. Récemment, plusieurs expériences sur des systèmes nano-électroniques à base de carbone ont montré que les interactions entre électrons (corrélation électronique) peuvent modifier de manière fondamentale le couplage entre électrons et phonons. Une équipe théorique de l'Institut Néel a montré qu'il était possible de calculer le couplage électron-phonon en incluant les effets de corrélation électronique en utilisant des méthodes ab-initio mais également de reproduire les données expérimentales.*

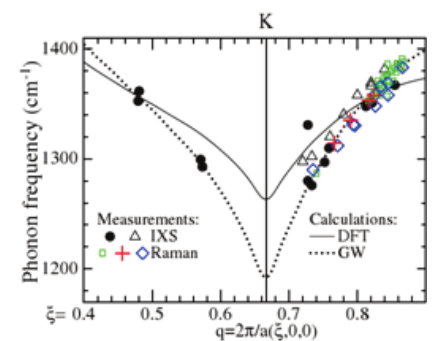
Le couplage électron-phonon caractérise les interactions qui se produisent, dans un solide, entre le mouvement des électrons et les vibrations des molécules ou de sa structure entière. Ces interactions influent sur les propriétés optiques, magnétiques et électroniques de ces solides.

Le couplage électron-phonon entre dans plusieurs phénomènes de la physique des solides : supraconductivité, spectres Raman, transport quantistique, structure atomique. Les méthodes ab-initio, basées sur la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT ou Density Functional Theory), permettent aujourd'hui de reproduire la plupart de ces phénomènes. Pourtant, ces techniques ne sont pas encore capables de prendre en compte les systèmes où la corrélation est forte.

Le graphène (cristal de carbone), et les systèmes à base de carbone en général, ont été toujours considérés comme des systèmes à corrélation faible, sur lesquels la DFT marche bien. Mais de récentes expériences de spectroscopie Raman et de diffusion de rayons X ont montré un désaccord avec la théorie.

C'est pour cette raison que l'équipe théorique de l'Institut Néel a décidé d'étudier le couplage électron-phonon au delà de la DFT. En utilisant la théorie des perturbations, aussi appelée approximation GW, ils ont réussi à corriger les résultats obtenus avec la DFT et à reproduire les données expérimentales [1, 2]. Pour réaliser ce type de calculs, l'équipe s'est servie d'un code « ondes planes », Yambo3, développé dans le même laboratoire en collaboration avec d'autres groupes européens.

Phonons dans le graphène : la ligne pleine reproduit les calculs réalisés avec DFT en approximation LDA, la ligne en pointillé les corrections apportées par l'utilisation de l'approximation GW, et les points les résultats expérimentaux.



L'équipe est actuellement en train d'étendre ce type d'études à des systèmes moléculaires et à des solides organiques [4]. Une première étude, appliquée au couplage électron-phonon dans la fullerène C<sub>60</sub> en GW, est en cours de soumission [5].

[1] M. Lazzeri, C. Attaccalite et al. Phys. Rev. B 78, 081406(R) (2008)

[2] C. Attaccalite et al., Nano Letters, 10(2) 1172 (2010)

[3] A. Marini et al., Comp. Phys. Comm. 180, 1392 (2009)

[4] X. Blase, C. Attaccalite, V. Olevano, Phys. Rev. B 83, 115103 (2011)

[5] C. Faber, J. L. Janssen, M. Côté, E. Runge, X. Blase, Electron-phonon coupling in the C<sub>60</sub> fullerene within the many-body GW approach. En préparation.