Thibault Sohier

Titre:

Modélisation ab-initio des interactions électron-phonon dans les matériaux 2D.

Résumé:

Les mécanismes impliquant les interactions électron-phonon sont au coeur des propriétés électroniques et vibratoires des matériaux. Leur compréhension et notre capacité à les simuler est donc essentielle à l'élaboration de nouvelles technologies exploitant les matériaux 2D.
Tout comme les techniques expérimentales, les méthodes ab-initio ont dû évoluer pour traiter correctement cette nouvelle catégorie de matériaux.

Je présente ici le développement et l'application de la théorie des perturbations de la fonctionnelle densité pour simuler les matériaux 2D, isolés ou chargés par effet de champ.
Cet outil a notamment permis la modélisation détaillée du couplage electron-phonon et du transport électronique dans le graphène; du comportement des phonons optiques polaires (interaction de Fröhlich et séparation des modes LO et TO); ainsi que la dépendance en dopage du spectre Raman des dichalcogénures de métaux de transitions.

Ce développement ab-initio est également l'un des outils principaux dans un effort de découverte et caractérisation de nouveaux matériaux 2D par calculs numériques à haute densité. Notre base de donnée en recense près de 2000. En m’appuyant sur la quantité et diversité des informations à disposition, j’ai pu dresser un portrait général des interactions electron-phonon dans les matériaux 2D.