

Couplage électron-phonon dans des semiconducteurs: effet sur les propriétés optiques et propriétés de transport.

Jelena Sjakste^{1*}, Nathalie Vast¹ et Valeriy Tyuterev²

1. Laboratoire des Solides Irradiés, CEA-DSM-DRECAM, CNRS, 91128 Palaiseau, France.

2. Tomsk State Pedagogical University, Tomsk, Russia.

* jelena.sjakste@polytechnique.edu

Pour les électrons excités dans la bande de conduction à des énergies d'excitation inférieures à deux fois l'énergie de la bande interdite, la dynamique de désexcitation électronique est gouvernée par les interactions avec les phonons. La description du couplage électron-phonon sans paramètre ajustable [1] est cruciale pour les simulations de transport électronique et thermique, en particulier dans des matériaux nanostructurés. Elle est également très importante pour décrire les élargissements des niveaux électroniques et les temps de vie des électrons excités. Surtout, lorsque plusieurs sources d'élargissement ou plusieurs mécanismes de diffusion des électrons sont présents, une méthode *ab initio* s'avère cruciale pour l'interprétation des expériences.

Nous allons présenter nos résultats récents concernant le couplage des électrons avec des phonons de courte longueur d'onde dans le silicium et le germanium. Notre approche est basée sur la théorie de perturbation de la fonctionnelle de la densité.

Dans le cas de germanium, nous avons calculé l'élargissement de niveau de l'exciton direct due au couplage électron-phonon en fonction de la pression [2]. Nos résultats sont en très bon accord avec l'expérience. Dans le cas de silicium, nous avons combiné l'équation de transport de Boltzmann avec l'approche *ab initio* afin de calculer les coefficients thermoélectriques. Les quantités calculées sont en excellent accord avec les expériences (Fig. 1) [3].

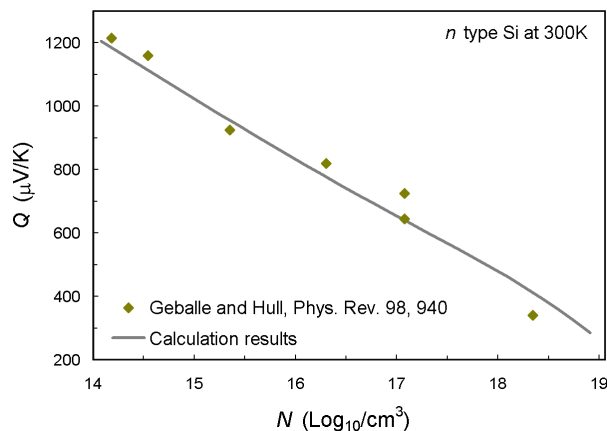


Fig. 1: Coefficient de Seebeck en fonction de la concentration en porteurs pour Si dopé n Si à $T = 300$ K, [3].

Finalement, nous allons discuter les transitions entre les niveaux d'impuretés dans Si dopé. Récemment, les centres d'impureté dans le silicium ont attiré beaucoup d'intérêt dans le cadre de développement des lasers dans le domaine des térahertz [4]. Nous montrons que le temps de vie de certains niveaux d'impuretés du au couplage électron-phonon est beaucoup plus long que ce qu'on avait cru depuis cinq décennies [5].

Références

- [1] J. Sjakste, N. Vast, V. Tyuterev, Phys. Rev. Lett. **99**, 236405 (2007)
- [2] V. Tyuterev, S. Obukhov, N. Vast, J. Sjakste, (2011), submitted
- [3] Z. Wang, S. Wang, S. Obukhov, N. Vast, J. Sjakste, V. Tyuterev, N. Mingo Phys. Rev. B (2011), accepted
- [4] S. G. Pavlov et al, Phys. Rev. Lett. **96** 037404 (2006)
- [5] V. Tyuterev, J. Sjakste, N. Vast, Phys. Rev. B **81**, 245212 (2010)