

# Dynamique du phonon cohérent dans le bismuth photoexcité

---

Y. Giret<sup>1</sup>, A. Gellé<sup>2</sup> et B. Arnaud<sup>2\*</sup>

1. *University college of London*

2. *Institut de Physique de Rennes, CNRS/Université de Rennes 1, Rennes*

\* *brice.arnaud@univ-rennes1.fr*

Le bismuth est un système modèle dans l'étude des mécanismes de génération de phonons cohérents. En effet, une impulsion laser ultra-courte excite de façon sélective un phonon en centre de zone de symétrie  $A_{1g}$ . Les expériences de type pompe-sonde optique permettent de suivre les variations de la réflectivité optique induites par le phonon cohérent mais ne fournissent pas d'informations directes sur l'amplitude du déplacement des atomes[1]. Plus récemment, des expériences de diffraction X résolues en temps ont démontré qu'il était possible de suivre la dynamique du phonon[2]. Les calculs *ab-initio* couplés à des modèles sont alors essentiels pour interpréter ces expériences et comprendre les différentes étapes de la génération de phonons cohérent.

Nous avons dans un premier temps calculé la dynamique du phonon à entropie électronique constante. Ces calculs nous ont permis de confirmer le mécanisme displacif de génération de phonons cohérents[1] et d'établir qu'une dynamique à entropie constante était pertinente pour décrire les premières oscillations du phonon observées dans les expériences.

Nous avons ensuite abordé le problème de l'évolution temporelle de l'intensité des raies de Bragg mesurées dans des expériences de diffraction X résolues en temps[2] et avons développé un modèle thermodynamique[3], inspiré du modèle à deux températures, pour décrire l'évolution simultanée de la température électronique et de la température du réseau. L'accord entre expérience et théorie est d'autant plus remarquable que les fluences utilisées dans les simulations sont très proches des fluences expérimentales et que la force agissant sur le phonon cohérent ainsi que la plupart des paramètres du modèle sont obtenus à partir de calculs *ab-initio*. Ces résultats montrent en particulier que la diffusion de la chaleur dans le système électronique est cruciale et que les oscillations du phonon cohérent s'accompagnent d'une oscillation de la température électronique.

## Références

[1] H.J. Zeiger *et al.*, Phys. Rev. **B 45**, 768 (1992)

[2] D.M. Fritz *et al.*, Science **315**, 633 (2007)

[3] Y. Giret, A. Gellé and B. Arnaud, Phys. Rev. Lett. **106**, 155503 (2011)