

## Physique de la matière condensée

Antoine GEORGES, Professeur

### COURS ET SÉMINAIRES

#### CORRÉLATIONS ÉLECTRONIQUES ET TRANSPORT DANS LES OXYDES 4D ET LES COMPOSÉS SUPRACONDUCTEURS DU FER : HUND PLUTÔT QUE MOTT, DRUDE PLUTÔT QUE LANDAU

Le cours s'est déroulé du 2 mai au 13 juin 2012. Il était, cette année, en prise directe avec des recherches menées dans notre équipe, et on pourra se référer à la description des activités de recherche de la chaire ci-dessous pour plus de détails. Il est disponible (formats audio et vidéo) sur le site internet du Collège de France : <http://www.college-de-france.fr/site/antoine-georges/index.htm#lm=courselq=/site/antoine-georges/course-2011-2012.html>

Une première partie du cours concernait l'effet du couplage de Hund sur les corrélations électroniques dans plusieurs classes de matériaux, en particulier les oxydes de métaux de transition 4d (comme les ruthénates), et les composés supraconducteurs du fer. Le point central est que le couplage de Hund peut induire des effets de corrélations fortes dans ces matériaux, bien qu'ils ne soient pas proches d'une transition métal-isolant de Mott. Plusieurs séminaires sont venus compléter cette première partie du cours. Félix Baumberger (St Andrews) a présenté les études menées par spectroscopie de photoémission sur les ruthénates. Luca de Medici (LPS-Orsay) a présenté le rôle du couplage de Hund dans les pnictures et chalcogénures de fer. Silke Biermann a présenté les progrès récents sur les méthodes de calcul de l'interaction écrantée dans ces matériaux, et Florence Rullier-Albenque, leurs propriétés de transport.

Une seconde partie du cours s'est attachée à décrire les différents régimes de transport dans les métaux à fortes corrélations électroniques, et leur description théorique. Dans de nombreux oxydes, on observe un régime de transport de type liquide Fermi à des températures très basse ( $\sim 20$  K dans  $\text{Sr}_2\text{RuO}_4$ ) et un régime de « mauvais métal » à très haute température, dans lequel la résistivité ne sature pas et excède la valeur de Mott-Ioffe-Regel. Le cours a présenté les aspects phénoménologiques de ces différents régimes et certains travaux théoriques récents

menés dans notre équipe sur cette question (voir ci-dessous). Quatre séminaires ont complété cette partie du cours. Neven Barisić (CEA-Saclay) a présenté des travaux expérimentaux récents sur les propriétés de transport des cuprates sous dopés. Nigel Hussey (Bristol) a donné un exposé de revue sur les propriétés de transport dans les cuprates. Enfin, Sriram Shastry (UC Santa Cruz) a présenté deux exposés théoriques : l'un sur le pouvoir thermoélectrique des métaux corrélés, et l'autre sur son approche de liquide de Fermi dans le régime de « corrélations extrêmes ».

#### ENSEIGNEMENT À L'ÉTRANGER ET AUTRES ENSEIGNEMENTS

Trois cours ont été donnés par A. Georges en mars 2012, dans le cadre des enseignements du Collège de France et de la convention avec l'université de Trento (Italie). Ces cours avaient pour thème la physique des atomes ultra-froids dans les réseaux optiques. Ils ont été accompagnés par deux journées d'étude réunissant les physiciens du BEC-Center (Trento) et les équipes des professeurs Immanuel Bloch (Munich/Garching) et Massimo Inguscio (Firenze). Voir :

<http://bec.science.unitn.it/infm-bec/activities/TN-Munich-2012.pdf>

<http://bec.science.unitn.it/infm-bec/activities/Trento-Florence-2012.pdf>

En novembre 2011, A. Georges a été invité en tant que lauréat de la « chaire Schrödinger » de l'ETH- Zurich à donner un séminaire et deux cours sur le thème général des matériaux à fortes corrélations électroniques et des approches de champ moyen dynamique. Voir : <http://www.paulicenter.ch/schroedinger/georges2011.html>

En décembre 2011, A. Georges a donné, avec M. Ferrero (CPHT-École polytechnique) et M. Aichhorn (université de Graz), une série de cours sur les méthodes de calculs de structure électronique utilisant la théorie du champ moyen dynamique au « Centro Atomico Bariloche » (Argentine) dans le cadre de l'école « ANDES/ALPS school on numerical methods for many-body theory ». Voir :

[http://fisica.cab.cnea.gov.ar/mbt16/index.php/ANDES/ALPS\\_School\\_on\\_Numerical\\_Methods\\_for\\_Many-Body\\_Theories](http://fisica.cab.cnea.gov.ar/mbt16/index.php/ANDES/ALPS_School_on_Numerical_Methods_for_Many-Body_Theories)

En décembre 2011, A. Georges a également donné une série de conférences sur le même sujet dans le cadre du « ICTS Condensed Matter Program (Bangalore, Inde). Voir :

<http://www.icts.res.in/archive/program/details/313/>

*Enseignements à l'École polytechnique* : cours de niveau master-1 « Physique quantique des électrons dans les solides » (A. Georges avec S. Biermann).

*Enseignement au master « Concepts fondamentaux de la physique »*. Cours « Fermions et bosons fortement corrélés » (A. Georges avec X. Leyronas, C. Mora, O. Parcollet), septembre-décembre 2011.

#### ORGANISATION DE COLLOQUES

Co-organisation d'une rencontre/atelier avec l'équipe du professeur Masatoshi Imada (université de Tokyo), en juin 2012, dans le cadre de notre programme collaboratif JST-CREST. Cette rencontre s'est tenue à la Fondation Hugot du Collège de France.

## ACTIVITÉS DE RECHERCHE DE L'ÉQUIPE

Équipe de recherche : « Matériaux quantiques à fortes corrélations », Centre de physique théorique (CPHT, CNRS UMR-7644), École polytechnique, 91128 Palaiseau.

Membres (2011-2012) : Michel Ferrero, Antoine Georges, Leonid Pourovskii (permanents) ; Xiaoyu Deng, Charles Grenier, Hartmut Hafermann, Jernej Mravlje, Shiro Sakai, Evgeny Kozik (postdocs) ; Igor Reshetnyak (doctorant).

Site web : <http://www.cpht.polytechnique.fr/cpht/correl/mainpage.htm>

Les *matériaux à fortes corrélations quantiques* sont caractérisés par l'échec des descriptions en termes de fonctions d'ondes de particules indépendantes. Cette situation est fréquente dans le cas de matériaux à bandes étroites, dans lesquels les électrons « hésitent » entre un comportement itinérant et un comportement localisé. C'est le cas des métaux de transition (couches 3d, 4d, 5d) et surtout de leurs oxydes, des composés de terres rares et d'actinides (couches 4f et 5f), et de nombreux solides moléculaires. De plus, les développements expérimentaux de ces dix dernières années dans le domaine des gaz atomiques ultra-froids permettent aujourd'hui de réaliser de véritables « solides artificiels » constitués par des atomes piégés dans un potentiel lumineux périodique (réseau optique). Ces nouveaux systèmes permettent d'explorer la physique des fortes corrélations quantiques avec un degré de contrôle et dans des régimes jusqu'alors inaccessibles.

Les activités de notre équipe de recherche s'organisent au sein de ce vaste domaine, autour de plusieurs directions différentes, depuis des aspects fondamentaux jusqu'à des questions liées aux propriétés de matériaux particuliers (parfois en liaison avec certaines applications).

### **Développement de méthodes théoriques pour le traitement des corrélations fortes.**

Les systèmes fermioniques en interaction soulèvent des difficultés théoriques considérables. Les approches numériques directes sont limitées, d'une part par la taille exponentielle de l'espace de Hilbert, d'autre part (pour les simulations Monte Carlo) par le fait que le signe des amplitudes fermioniques n'est pas constant. Pour cette raison, la recherche d'approches efficaces, tant analytiques que numériques, constitue un problème central de la physique théorique. Notre équipe de recherche est très activement impliquée dans ces développements méthodologiques, qui servent de fondation à la plupart de nos travaux consacrés à des systèmes physiques particuliers.

Au cours des vingt dernières années, la « théorie du champ moyen dynamique » (en abrégé DMFT pour « Dynamical Mean-Field Theory ») a permis des avancées notables dans notre compréhension des systèmes de fermions en interaction. Les fondements de cette approche ont été établis au début des années 1990. Le principe directeur de cette méthode est de décrire un solide comme un « atome effectif » plongé dans un milieu auto-cohérent avec lequel il peut échanger des électrons. Parmi les premiers succès de cette approche, on peut mentionner en particulier une description théorique détaillée de la transition métal-isolant de Mott, prenant en compte à la fois les quasiparticules et les excitations incohérentes et permettant de décrire les transferts de poids spectral entre ces deux types d'excitations (détectés par les mesures d'optique ou de photoémission).

Une large part des développements méthodologiques effectués dans notre équipe est consacrée à des extensions de cette méthode, soit pour en étendre le domaine d'applicabilité, soit pour en dépasser les limitations en étendant ce cadre théorique.

### **Des modèles aux matériaux réels : intégration de méthodes à N corps aux calculs de structure électronique**

Les calculs de structure électronique pour les matériaux à fortes corrélations électroniques ne peuvent se contenter du cadre de la théorie de la fonctionnelle de densité dans l'approximation de la densité locale (LDA). Alors qu'elle est si fructueuse pour de nombreux matériaux, cette approximation ne conduit dans ces cas ni à une description satisfaisante des excitations électroniques ni même des propriétés de l'état fondamental (volume d'équilibre, module élastique).

Un développement majeur, depuis une dizaine d'années, a été l'intégration de la méthode du champ moyen dynamique aux calculs de structure électronique utilisant la théorie de la fonctionnelle de densité pour l'étude réaliste de matériaux fortement corrélés. Cette intégration a nécessité de nombreux développements techniques, dans le cadre de codes numériques souvent assez sophistiqués. Cette recherche a un aspect interdisciplinaire puisqu'elle combine les méthodes de la mécanique quantique des systèmes en interaction avec celles de la structure électronique des solides.

Un projet de longue haleine mené à bien dans notre équipe (Aichhorn *et al.*, 2009, 2011) a été l'intégration de l'approche DMFT dans le cadre d'une méthode de calcul de structure électronique de haute précision (ondes planes augmentées FLAPW, code Wien2k). Notre approche utilise des fonctions de Wannier permettant de sélectionner les orbitales sur lesquels les effets à N corps sont traités. Ces orbitales permettent de marier l'intuition du chimiste et les méthodes quantitatives de la physique. Notre implémentation utilise de plus – dans le cadre d'une étroite collaboration avec O. Parcollet (IPhT, CEA-Saclay) – tous les avantages des algorithmes de Monte Carlo quantique en temps continu, dont le développement récent a permis des progrès remarquables dans la solution du problème local qui est au cœur de la méthode DMFT. Cette implémentation est intégrée dans la librairie numérique « open-source » TRIQS (« Tools for Research on Interacting Quantum Systems »), développée par Olivier Parcollet (IPhT-CEA-Saclay) et, dans notre équipe, par Michel Ferrero, dont la première diffusion publique sur le web a eu lieu en 2011 (<http://ipht.cea.fr/triqs>).

### **Études de matériaux à fortes corrélations électroniques (métaux de transition, composés de terres rares)**

Notre équipe poursuit des travaux sur différents matériaux à fortes corrélations électroniques présentant des propriétés physiques originales. En 2011-2012, nous nous sommes particulièrement intéressés aux effets de corrélations électroniques qui ne sont pas induits par la physique de Mott-Hubbard, mais plutôt par d'autres couplages, comme l'échange intra-atomique (couplage de Hund). Nous nous sommes également intéressés à la description théorique du transport dans les matériaux corrélés.

### *Corrélations électroniques dues au couplage de Hund*

Nous avons montré (de Medici L., Mravlje J., Georges A., 2012) dans le cadre d'études modèles que le couplage de Hund avait deux effets antagonistes, lorsque la couche électronique considérée n'est ni demi-pleine, ni occupée par un seul électron (ou un seul trou), par exemple pour les matériaux ayant deux ou quatre électrons dans trois orbitales formant les niveaux  $t_{2g}$  d'un oxyde en symétrie cubique. D'une part, le couplage de Hund augmente fortement la valeur critique  $U_c$  conduisant à un isolant de Mott : l'extension de la phase métallique est donc élargie. D'autre part, l'échelle de cohérence des quasiparticules est fortement diminuée par le couplage de Hund, un effet connu depuis longtemps dans le contexte des modèles d'impuretés Kondo. On a donc une large plage correspondant à un métal très corrélé, ayant par exemple une faible conductivité (« mauvais métal »). Sur la base de ces considérations, nous avons proposé une classification des oxydes de métaux de transition 3d et 4d, qui met en lumière le rôle prédominant du couplage de Hund pour ces derniers (mais aussi pour d'autres matériaux comme les supraconducteurs à base de Fer, proposition due à Haule et Kotliar (Rutgers) et confirmée par notre travail sur FeSe – Aichhorn *et al.*, 2010).

Cette observation place dans un cadre plus général notre travail précédent sur l'oxyde de ruthénium  $Sr_2RuO_4$  (Mravlje *et al.*, 2011), un des oxydes de métaux de transition dont les propriétés physiques ont été étudiées de manière très détaillée grâce à la qualité des échantillons qu'il est possible de synthétiser. Nous avons montré, sur la base de calculs LDA+DMFT, que les corrélations électroniques observées dans ce matériau sont principalement dues au couplage de Hund, qui conduit aussi à un effet de différenciation orbitale. En raison de cet effet, l'orbitale  $d_{xy}$  est particulièrement sensible à la singularité de van Hove, ce qui explique que cette orbitale ait la masse effective la plus élevée.

Dans un travail récent (Mravlje J., Aichhorn M. et Georges A., 2012), nous avons montré que les considérations sur l'abaissement de la transition de Mott dans les composés demi-remplis permettaient de placer l'oxyde de Technetium  $SrTcO_3$  très près de cette transition, ce qui explique sa température de Néel remarquablement élevée (près de 1000 degrés Kelvin).

La physique du couplage de Hund ayant fait l'objet d'un intérêt croissant de nombreuses équipes travaillant dans ce domaine, nous avons rédigé une synthèse de ce domaine qui tente de dégager les principaux résultats et les principaux mécanismes physiques (Georges A., de Medici A et Mravlje J., *Annual Reviews of Condensed Matter Physics*, sous presse).

### *Transport dans les métaux corrélés : du liquide de Fermi au « mauvais métal »*

Le transport électronique dans les métaux à fortes corrélations électroniques est un problème encore assez mal compris. Dans de nombreux oxydes, on observe souvent un régime de transport de type liquide Fermi à des températures très basses devant les échelles électroniques caractéristiques ( $\sim 20$  K dans  $Sr_2RuO_4$ ) et un régime de « mauvais métal » à très haute température, dans lequel la résistivité ne sature pas et excède la valeur de Mott-Ioffe-Regel. Nous avons mené (Deng *et al.*, 2012) une étude théorique approfondie de ces effets, sur un modèle simple d'isolant de Mott faiblement dopé. Nous avons montré que le régime de liquide Fermi et celui de mauvais métal étaient connectés par un régime intermédiaire dans lequel

des quasiparticules bien définies continuent à exister mais ne satisfont pas à la théorie de Landau. La disparition de ces excitations a une signature très claire en spectroscopie optique par exemple. De plus, ce régime est caractérisé par une très forte asymétrie entre excitations de type « trous » et excitations de type « particules », ces dernières ayant dans le cas d'un isolant de Mott dopé en trous, une durée de vie bien supérieure. Cette asymétrie a des conséquences importantes pour les propriétés thermoélectriques par exemple.

### Atomes ultra-froids dans les réseaux optiques

Une nouvelle frontière de la physique de la matière condensée a été récemment ouverte avec l'étude des atomes froids en forte interaction. Bien que ces gaz soient dilués, il est néanmoins possible d'accéder à des régimes de fortes corrélations en utilisant d'une part la possibilité de faire varier la longueur de diffusion grâce aux résonances de Feshbach et d'autre part le piégeage de ces atomes froids dans le potentiel périodique d'un réseau optique. Ces études se sont beaucoup développées avec en particulier l'observation de la transition de Mott d'atomes bosoniques (2002), et plus récemment, du régime de Mott d'atomes fermioniques (équipes de T. Esslinger à l'ETHZ et de I. Bloch à Mainz). Certaines des études menées dans notre équipe dans ce domaine s'inscrivent dans le contexte de collaborations avec plusieurs groupes expérimentaux (LKB-ENS, ETHZ, Cambridge).

En 2011-2012, les principaux thèmes abordés dans ce domaine par notre équipe ont été les suivants :

– *Compétition entre dissipation et interactions.* Dans le cadre d'une collaboration avec l'équipe de C. Kollath (université de Genève), nous avons montré que les effets dissipatifs (du type de ceux induits par l'émission spontanée par exemple) entrent en compétition avec les effets d'interaction. Pour des atomes bosoniques, cette compétition est particulièrement forte, et peut conduire à un *ralentissement de la décohérence* en présence d'interactions répulsives fortes. Nous avons pu résoudre analytiquement un modèle simple illustrant cet effet et montrer qu'il donnait lieu à une diffusion anormale dans l'espace des états (Poletti *et al.*, 2012).

– *Transport thermoélectrique dans les atomes ultra-froids.* Nous avons proposé d'utiliser les gaz atomique ultra-froids pour mener des études fondamentales sur le transport thermique, et surtout sur les propriétés thermoélectriques des systèmes quantiques (Grenier C., Kollath C. et Georges A., 2012). En utilisant la géométrie de « constriction » entre deux réservoirs récemment mise au point dans l'équipe de T. Esslinger à l'ETH-Zurich, nous avons proposé un protocole précis pour sonder la présence de coefficients de transport thermoélectrique. Ce protocole est un analogue, en régime transitoire, de l'effet Seebeck.

### PRINCIPALES COLLABORATIONS

De nombreux travaux de notre équipe de recherche s'inscrivent dans le cadre de collaborations, avec des équipes théoriques ou expérimentales.

**Collaborations au niveau national :**

- ENS, Laboratoire Kastler-Brossel (J. Dalibard, C. Salomon, F. Gerbier et coll.).
- CEA-Saclay, IPhT (O. Parcollet, G. Biroli).
- CEA-Saclay, SPEC (F. Rullier-Albenque).
- Université Denis Diderot, Paris, Laboratoire Matériaux et phénomènes quantiques (équipe de A. Sacuto et coll.).
- Université Paris-Sud, Orsay, Laboratoire de Physique des solides (L. de Medici, V. Brouet, M. Marsi et coll.).

**Collaborations internationales :**

- Rutgers University (équipe de G. Kotliar, collaboration financée par le Partner University Fund, la National Science Foundation et le CNRS – programme LIA)
- Columbia University (équipe de A.J. Millis)
- Programme DARPA-OLE (MIT, W. Ketterle)
- University of Tokyo (équipe de M. Imada, collaboration financée par le programme JST-CREST)
- Tsukuba, RICS-AIST (T. Miyake, F. Aryasetiawan, collaboration financée par le programme JST-CREST)
- Institut de physique de l'Académie des sciences, Beijing (IOP-CAS) : Xi Dai
- Beijing University, Prof. Hong Jiang
- Université de Genève, Suisse (T. Giamarchi, D. Jaccard, D. van der Marel, J-M. Triscone DPMC ; C. Kollath, DPT)
- ETH-Zurich, Suisse (équipes de M. Troyer et de T. Esslinger)
- Cambridge University, UK (équipe de M. Köhl)
- Universität Hamburg, Allemagne (équipes de A. Lichtenstein et F. Lechermann)
- Autriche : Université de Graz (M. Aichhorn), TU Wien (K. Held, G. Sangiovanni)
- Université de Linköping, Suède (I. Abrikosov)

## PUBLICATIONS DE L'ÉQUIPE (2011, 2012)

Aichhorn M., Purovskii L. et Georges A., « Importance of electronic correlations for structural and magnetic properties of the iron pnictide superconductor  $\text{LaFeAsO}'$  », *Phys. Rev.*, *B* 84, 2011, 054529.

Boehnke L., Hafermann H., Ferrero M., Lechermann F. et Parcollet O., « Orthogonal polynomial representation of imaginary-time Green's functions », *Phys. Rev.*, *B* 84, 2011, 075145.

Dao T.-L., Ferrero M., Cornaglia P.S. et Capone M., « Mott transition of fermionic mixtures with mass imbalance in optical lattices », *Phys. Rev.*, *A* 85, 2012, 013606.

De Leo L., Bernier J.-S., Kollath C., Georges A. et Scarola V.W., « Thermodynamics of the three-dimensional Hubbard model: Implications for cooling cold atomic gases in optical lattices », *Phys. Rev.*, *A* 83, 2011, 023606.

Deng X., Ferrero M., Mravlje J., Aichhorn M. et Georges A., « Hallmark of strong electronic correlations in  $\text{LaNiO}_3$ : Photoemission kink and broadening of fully occupied bands », *Phys. Rev.*, *B* 85, 2012, 125137.

Deng X, Mravlje J., Zitko R., Kotliar G. et Georges A., « How bad metals turn good: spectroscopic signatures of resilient quasiparticles », *ArXiv e-prints*, 2012.

Georges A., « Thinking locally: Reflections on Dynamical Mean-Field Theory from a high-temperature/high-energy perspective », *Annalen der Physik*, 523, 2011, 672-681.

Georges A., de Medici L. et Mravlje J., « Strong electronic correlations from Hund's coupling », *ArXiv e-prints*, 2012, 1207.3033

Glazyrin K., Pourovskii L.V., Dubrovinsky L., Narygina O., McCammon C., Hewener B., Schünemann V., Wolny J., Muffler K., Chumakov A.I., Crichton W., Hanfland M., Prakapenka V., Tasnádi F., Ekholm M., Aichhorn M., Vildosola V., Ruban A.V., Katsnelson M.I. et Abrikosov I.A., « Importance of correlation effects in hcp iron revealed by a pressure-induced electronic topological transition », *ArXiv e-prints*, 2012, 1204.5130

Grenier C., Kollath C. et Georges A., « Probing thermoelectric transport with cold atoms », *ArXiv e-prints*, 2012, 1209.3942.

Hafermann H., Lechermann F., Rubtsov A.N., Katsnelson M.I., Georges A. et Lichtenstein A.I., « Strong Electronic Correlations: Dynamical Mean-Field Theory and Beyond », in Cabra D.C., Honecker A. et Pujol P. (éd.), *Lecture Notes in Physics*, Berlin, Springer Verlag, 2012, 145.

de Medici L., Mravlje J. et Georges A., « Janus-Faced Influence of Hund's Rule Coupling in Strongly Correlated Materials », *Phys. Rev. Lett.*, 107, 2011, 256401.

Mirzaei S.I., Stricker D., Hancock J.N., Berthod C., Georges A., van Heumen E., Chan M.K., Zhao X., Li Y., Greven M., Bar sić N. et van der Marel D., « Evidence for a Fermi liquid in the pseudogap phase of high-Tc cuprates », *ArXiv e-prints*, 2012, 1207.6704.

Mravlje J., Aichhorn M. et Georges, A., « Origin of the High Néel Temperature in SrTcO<sub>3</sub> », *Phys. Rev. Lett.*, 108, 2012, 197202.

Mravlje J., Aichhorn M., Miyake T., Haule K., Kotliar G. et Georges A., « Coherence-Incoherence Crossover and the Mass-Renormalization Puzzles in Sr<sub>2</sub>RuO<sub>4</sub> », *Phys. Rev. Lett.*, 106, 2011, 096401.