

## Physique de la matière condensée

M. Antoine GEORGES, professeur

### COURS ET SÉMINAIRE : CUPRATES SUPRACONDUCTEURS, OÙ EN EST-ON ?

Cette année, le cours était intitulé : « Cuprates supraconducteurs, où en est-on ? ». Il s'est déroulé du 9 novembre au 14 décembre 2010, et avait pour ambition de donner un aperçu (nécessairement très partiel) sur l'état actuel de notre compréhension de ces matériaux remarquables, découverts en 1986 par Bednorz et Müller (prix Nobel 1987) et qui soulèvent encore aujourd'hui de nombreuses interrogations. Afin de permettre une implication active de la communauté des expérimentateurs et théoriciens de ce domaine, l'enseignement a été organisé sous la forme de cinq après-midi comportant en général un cours et deux séminaires, suivis d'une discussion.

Les deux cours de la première séance (9 novembre) ont introduit les grandes familles de matériaux, ainsi que les caractéristiques générales du diagramme de phases, en insistant sur les caractéristiques communes aux différentes familles. Dans le séminaire, Henri Alloul (LPS-Orsay) a présenté une synthèse et une revue critique des expériences de résonance magnétique nucléaire sur ces matériaux, en insistant en particulier sur la physique du « *pseudogap* ». C'est également sur cet aspect que portait le troisième cours (deuxième séance, 16 novembre), dans lequel on a particulièrement insisté sur les manifestations de ce *pseudogap* en spectroscopie de photoémission : dichotomie entre régions « nodales » et antinodales de la zone de Brillouin, et suppression des quasiparticules de l'état métallique dans ces régions.

Le quatrième cours (30 novembre) a été consacré aux idées théoriques de « configurations résonantes de singulets » (« *resonating valence bonds* » ou RVB), proposées dès 1986 par P.W. Anderson. On a montré comment formuler cette approche en termes de bosons-esclaves. Dans ces approches, l'origine de l'appariement en paires est le super-échange antiferromagnétique. Le paramètre d'ordre supraconducteur a une symétrie-*d*. C'est également ce couplage qui est responsable du *pseudogap* (également de symétrie-*d*) dans cette approche, dont une caricature simple est l'apparition d'une phase de flux alternée (qu'on peut considérer comme une version primitive des observations récentes sur les boucles de courant). Ce cours portant sur les aspects théoriques a été complété par un séminaire, donné

lors de la dernière séance (14 décembre) par A. Georges, qui a présenté quelques développements théoriques récents permettant de comprendre la formation du *pseudogap* dans ces matériaux et sa relation avec l'apparition de corrélations magnétiques à courte portée (formation de singulets de *spin*). Ces approches utilisent les extensions « en amas » de la théorie de champ moyen dynamique.

Les cinquième et sixième cours (séances des 30 novembre et 14 décembre) ont porté sur les propriétés physiques de la phase supraconductrice de ces matériaux : mise en évidence de la symétrie-*d* du paramètre d'ordre, densité superfluide et conséquences pour la température critique, conséquences physiques de la présence de quasiparticules nodales, existence de deux échelles d'énergie, corrélations possibles entre température critique et structure des composés.

Les cours ont été complétés de manière essentielle par un cycle de séminaires, dont l'objectif était de faire le point sur les apports des différentes techniques expérimentales à notre compréhension de ces matériaux. Outre le séminaire de H. Alloul sur la RMN déjà cité, ont été ainsi abordées : les mesures de conductivité thermique et d'effet Nernst (K. Behnia, ESPCI : « Transport d'entropie dans les cuprates supraconducteurs »), les expériences de microscopie tunnel (C. Berthod, université de Genève : « Spectroscopie STM dans les cuprates »), la diffusion de neutrons. Cette dernière a fait l'objet de deux séminaires : le premier donnant une revue générale (Y. Sidis, LLB-Saclay) et le second (P. Bourges, LLB-Saclay) décrivant les questions soulevées par la découverte récente de « boucles de courant » dans l'état *pseudogap*. Lors de la séance du 30 novembre, le séminaire de A. Sacuto (LMPQ, université Paris-Diderot) portant sur « Température critique et appariement dans les oxydes de cuivre supraconducteurs » a permis une revue des apports de la diffusion Raman électronique, en revenant en particulier sur la dichotomie nœuds/anti-nœuds. Dans cette même séance, le séminaire de J. Lesueur, ESPCI) portait sur « Une mesure récente des fluctuations supraconductrices dans la phase sous-dopée des cuprates », pour conclure que le *pseudogap* n'est pas attribuable aux effets de fluctuations. Enfin, lors de la séance du 14 décembre, C. Proust (LNCMI, Toulouse) a passé en revue les résultats récents et très remarquables sur les oscillations quantiques (« Oscillations quantiques et magnéto-transport dans les cuprates supraconducteurs »).

L'ensemble du cycle d'enseignement s'est terminé par une séance de discussion, au cours de laquelle certains des orateurs intervenus dans les séminaires ont présenté leurs vues personnelles sur les questions encore largement ouvertes dans ce domaine.

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

Trois cours ont été donnés par A. Georges en mai 2011, dans le cadre des enseignements du Collège de France, à l'université de Genève, sur le thème : « Electronic Structure of Correlated Materials from a Dynamical Mean-Field Theory viewpoint: Introduction, State of the Art and Perspectives ».

Invité en tant que « Arnold Sommerfeld Lecturer » à la Ludwig Maximilian Universität (Munich) en janvier 2011, A. Georges a donné une conférence publique sur le thème « From Atoms to Novel Materials - A Quantum Engineer's Dream » (centrée sur la couleur des matériaux), un séminaire général (*colloquium*) sur le thème « Quantum matter with strong corrélations » et un séminaire plus spécialisé intitulé « Death of a quasiparticle ».

*Enseignements à l'École polytechnique.* Cours de niveau master-1 « Physique quantique des électrons dans les solides » (A. Georges, S. Biermann) ; enseignements de niveau master-1 « Matériaux fonctionnels » et « Couches minces fonctionnelles et surfaces actives : recherche et innovation » (S. Biermann, T. Gacoïn dans le cadre de la chaire École polytechnique-ESPCI-Saint Gobain).

*Enseignement au master « Concepts fondamentaux de la physique ».* Cours « Fermions et bosons fortement corrélés » (A. Georges, O. Parcollet), mars-juin 2011.

*Enseignements dans le cadre d'écoles.* A. Georges a donné plusieurs cours dans le cadre de l'école d'hiver du réseau suisse MANEP ayant eu lieu à Saas-Fe en janvier 2011, et S. Biermann des cours dans le cadre du *Hands-on Tutorial Workshop 2011 on Ab Initio Molecular Simulations* (Belrin, FHI, juillet 2011).

#### ORGANISATION DE COLLOQUES

Co-organisation d'une rencontre/atelier à l'université de Tokyo, en mars 2011, dans le cadre de notre programme collaboratif JST-CREST avec l'équipe du professeur Masatoshi Imada.

Organisation par S. Biermann (en collaboration avec P. Rinke, Fritz Haber Institut, Berlin) d'un *workshop* international sur le thème « Strong correlations from first principles » (Kloster Seeon, Allemagne, 30 août-2 septembre 2011).

#### 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 Cedex.

Membres (2010-2011) : Silke Biermann, Michel Ferrero, Antoine Georges, Leonid Poyurovskiy, Corinna Kollath\* (permanents) ; Peter Barmettler\*, Jean-Sébastien Bernier, Xiaoyu Deng, Hartmut Hafermann, Igor Krivenko, Jernej Mravlje, Dario Poletti\* (post-docs) ; Loïg Vaugier (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.

---

\* jusqu'en décembre 2010.

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.

#### *Modélisation théorique des cuprates supraconducteurs*

L'une des extensions à laquelle nous avons consacré de nombreux travaux récents est motivée par l'étude du modèle de Hubbard bidimensionnel, et par ses applications à la physique des oxydes de cuivre supraconducteurs (cuprates) « à haute température critique ». Cette approche consiste à généraliser l'approche DMFT à une « molécule » constituée non plus d'un seul site, mais d'un petit amas de taille finie couplé de manière auto-cohérente à son environnement. Une telle généralisation est essentielle pour décrire les corrélations spatiales de portée finie (par exemple les corrélations magnétiques) qui jouent un rôle essentiel dans la physique des cuprates. Nous avons en particulier poursuivi une approche originale, consistant à considérer un amas de taille minimale (deux sites) ce qui permet des calculs à très basse température et une meilleure compréhension qualitative du problème (Ferrero *et al.*, 2009, 2010).

De ces études se dégagent un certain nombre de conclusions qui sont robustes (c'est-à-dire qui ne sont pas limitées de manière cruciale par la résolution finie dans l'espace des impulsions et par la taille de l'amas, *cf.* Gull *et al.*, 2010). La principale d'entre elles est que le dopage d'un isolant de Mott bidimensionnel suit une voie

originale, dans laquelle les quasiparticules se développent sélectivement dans les régions diagonales (« nodales ») de la zone de Brillouin. Les « anti-nœuds » développent quand à eux un *pseudogap*, conséquence de la formation de singulets de courte portée. Ce *pseudogap* se manifeste dans ces calculs par l'apparition d'une transition de Mott sélective en impulsion. Ces conclusions sont en bon accord avec les observations expérimentales sur les cuprates, et permettent par exemple de décrire la formation d'arcs de Fermi et le comportement de la conductivité inter-plans (Ferrero *et al.*, 2010). Ces approches ont cependant une résolution limitée en impulsion, et le développement de nouvelles approches permettant de surmonter cette limitation est un enjeu majeur de la théorie des systèmes à fortes corrélations actuellement.

Cette différenciation entre nœuds et anti-nœuds est également observée dans l'état supraconducteur. Une collaboration initiée en 2006 avec l'équipe de spectroscopie Raman de l'université Denis Diderot (A. Sacuto *et al.*) a permis de mettre en évidence l'existence de deux échelles d'énergie, associée à ces deux régions de l'espace réciproque. Cette collaboration se poursuit aujourd'hui avec comme objectif de mieux comprendre l'origine de ces deux échelles. Nous avons récemment suggéré (Blanc *et al.*, 2010) qu'un facteur essentiel est la réduction rapide de la zone de cohérence des quasiparticules de Bogoliubov lorsque le dopage diminue.

### **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 « 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 aura lieu en septembre 2011 (<http://iph.t.cea.fr/triqs>).

Une nouvelle représentation des fonctions de Green en termes de polynômes orthogonaux a été proposée, et s'est révélée extrêmement efficace pour représenter ces fonctions dans les algorithmes numériques (Boehnke *et al.*, 2011).

Enfin, un autre développement méthodologique dans le domaine de la structure électronique des matériaux récemment poursuivi dans notre équipe est le calcul des interactions de Coulomb écrantées, dans le cadre d'une méthode de type RPA *ab initio*. Une nouvelle implémentation de cette approche a été menée à bien en 2010-2011 par L. Vaugier (thèse) et S. Biermann en collaboration avec l'équipe de Hong Jiang (Beijing University).

### **Études de matériaux à fortes corrélations électroniques (métaux de transition, composés de terres rares) : au delà de Mott-Hubbard**

Outre les études sur les cuprates supraconducteurs mentionnées plus haut, notre équipe poursuit des travaux sur différents matériaux à fortes corrélations électroniques présentant des propriétés physiques originales. En 2010-2011, 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 que la répulsion électronique locale (« Hubbard U »), comme l'échange intra-atomique (couplage de Hund) ou le couplage spin-orbite. Nous en citons ici trois exemples.

Nous avons montré (L. de Medici, J. Mravlje, A. Georges, 2011) 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. En revanche, 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, Aichhorn et Georges, 2011), 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 proche de cette transition, ce qui explique sa température de Néel remarquablement élevée (près de 1000 degrés Kelvin).

Enfin, pour les oxydes de métaux de transition de la couche 5d, comme les iridates, c'est le couplage spin-orbite qui joue un rôle essentiel, en combinaison avec la répulsion de Coulomb et les distorsions structurales, pour induire l'état isolant, comme l'a montré un travail récent sur  $Sr_2IrO_4$  (Martins *et al.*, 2011).

### 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).

Nous résumons ici brièvement quelques-unes des directions de recherche poursuivies par notre équipe dans ce domaine. Certaines de ces études s'inscrivent dans le contexte de collaborations avec plusieurs groupes expérimentaux (LKB-ENS, ETHZ, Cambridge).

– *Thermodynamique et thermométrie*. Nos calculs des propriétés thermodynamiques de fermions en interaction piégés dans un réseau optique tridimensionnel (De Leo *et al.*, 2011) ont permis une comparaison détaillée (Jördens *et al.*, 2010) aux expériences menées dans l'équipe de T. Esslinger à l'ETHZ. La conclusion de cette étude est que les températures actuellement atteintes en présence du réseau sont de l'ordre de grandeur de l'amplitude de transfert par effet tunnel entre sites.

– *Spectroscopies*. Le développement de nouvelles méthodes spectroscopiques permettant de sonder les propriétés physiques de ces systèmes est au cœur de nos travaux dans ce domaine. Nous avons proposé il y a quelques années, en collaboration avec l'équipe du LKB-ENS (J. Dalibard, C. Salomon) et I. Carusotto (Trento) une méthode permettant d'étudier les quasiparticules de manière résolue en impulsion et en énergie par diffusion Raman stimulée ou spectroscopie radio-fréquence. Cette méthode constitue un analogue de la spectroscopie de photoémission résolue en angle (ARPES) en physique des solides. La faisabilité expérimentale de cette méthode a été démontrée par l'équipe de D. Jin à Boulder. Dans un travail récent (Bernier *et al.*, 2010) nous montrons la possibilité d'effectuer par cette méthode une thermométrie directe de fermions en interaction faible dans le réseau. Nous montrons également comment les spectres rf et Raman révèlent les caractéristiques essentielles de phases de fermions en interaction répulsive. Enfin, dans le cadre d'une collaboration récente avec l'équipe de C. Salomon au LKB-ENS sur les gaz de fermions en interaction forte (Nascimbène *et al.*, 2011), nous avons comparé les

signatures possibles d'un *pseudogap* et d'un état de liquide de Fermi, en concluant que les expériences semblent privilégier ce dernier, proche de la limite unitaire.

– *Dynamique hors-équilibre*. Les études récentes menées dans notre équipe par C. Kollath et ses collaborateurs ont principalement portées sur le comportement de systèmes lors d'une « trempe » lente (*slow quench*), éventuellement en présence d'une modulation périodique du réseau optique (Poletti et Kollath, 2011 ; Bernier *et al.*, 2011). Dans le cas d'une modulation rapide, D. Poletti et C. Kollath (2011) ont établi que le système est décrit par un amiltonien effectif dans lequel les atomes sont « habillés » par le champ appliqué.

## 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) ;
- CEA-DAM, Bruyères le Châtel (B. Amadon) ;
- Université Denis Diderot, Paris, laboratoire Matériaux et phénomènes quantiques (équipe d'A. Sacuto *et coll.*) ;
- Université Paris-Sud, Orsay, laboratoire de Physique des solides (L. 'de Medici, V. Brouet, M. Marsi *et coll.*).

### Collaborations internationales

#### *États-Unis*

- 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) ;
- Harvard University (équipe de E. Demler, collaboration financée par le programme DARPA-OLE) ;
- University of California, San Diego (D. Basov) ;
- University of California, Santa Barbara (N. Spaldin *et coll.*) ;
- Virginia Tech (V. Scarola).

#### *Japon*

- 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).

#### *Chine*

- Institut de physique de l'Académie des sciences, Beijing (IOP-CAS) : Xi Dai ;
- Beijing University, Prof. Hong Jiang.

*Europe*

- Université de Genève, Suisse (T. Giamarchi, 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) ;
- TU Wien (G. Sangiovanni) ;
- Université de Linköping, Suède (I. Abrikosov).

## PUBLICATIONS DE L'ÉQUIPE (2010-2011)

Aichhorn M., Biermann S., Miyake T., Georges A. et Imada M., « Theoretical evidence for strong correlations and incoherent metallic state in FeSe », *Phys. Rev.*, *B* 82(6), 2010, 064504.

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

Bernier J.-S., Dao T.-L., Kollath C., Georges A. et Cornaglia P.S., « Thermometry and signatures of strong correlations from Raman spectroscopy of fermionic atoms in optical lattices », *Phys. Rev.*, *A* 81(6), 2010, 063618.

Bernier J.-S., Roux G. et Kollath C., « Slow Quench Dynamics of a One-Dimensional Bose Gas Confined to an Optical Lattice », *Phys. Rev. Lett.*, 106, 2011, 200601.

Biroli G., Kollath C. et Läuchli A.M., « Effect of Rare Fluctuations on the Thermalization of Isolated Quantum Systems », *Phys. Rev. Lett.*, 105, 2010, 250401.

Blanc S., Gallais Y., Cazayous M., Méasson M.A., Sacuto A., Georges A., Wen J.S., Xu Z.J., Gu G.D. et Colson D., « Loss of antinodal coherence with a single *d*-wave superconducting gap leads to two energy scales for underdoped cuprate superconductors », *Phys. Rev.*, *B* 82, 2010, 144516.

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.

Bouillot P., Kollath C., Läuchli A.M., Zvonarev M., Thielemann B., Rüegg C., Orignac E., Citro R., Klanjčič M., Berthier C., Horvatić M. et Giamarchi T., « Statics and dynamics of weakly coupled antiferromagnetic spin-1/2 ladders in a magnetic field », *Phys. Rev.*, *B* 83, 2011, 054407.

Brouet V., Rullier-Albenque F., Marsi M., Mansart B., Aichhorn M., Biermann S., Faure J., Perfetti L., Taleb-Ibrahimi A., Le Fèvre P., Bertran F., Forget A. et Colson D., « Significant Reduction of Electronic Correlations upon Isovalent Ru Substitution of BaFe<sub>2</sub>As<sub>2</sub> », *Phys. Rev. Lett.*, 105, 2010, 087001.

Brouet V., Rullier-Albenque F., Marsi M., Mansart B., Aichhorn M., Biermann S., Faure J., Perfetti L., Taleb-Ibrahimi A., Le Fèvre P., Bertran F., Forget A. et Colson D., « Significant Reduction of Electronic Correlations upon Isovalent Ru Substitution of BaFe<sub>2</sub>As<sub>2</sub> », *Phys. Rev. Lett.*, 105(8), 2010, 087001.

Casula M., Rubtsov A. et Biermann S., « Dynamical screening effects in correlated materials: plasmon satellites and spectral weight transfers from a Green's function ansatz to extended dynamical mean field theory », *ArXiv e-prints*, 2011, 1107.3123.

Dao T.-L., Kollath C., Carusotto I. et Köhl M., « All-optical pump-and-probe detection of two-time correlations in a Fermi gas », *Phys. Rev.*, *A* 81(4), 2010, 043626.

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 », *ArXiv e-prints*, 2011, 1107.5920.

Ferrero M., Parcollet O., Georges A., Kotliar G. et Basov D.N., « Interplane charge dynamics in a valence-bond dynamical mean-field theory of cuprate superconductors », *Phys. Rev., B* 82(5), 2010, 054502.

Gull E., Ferrero M., Parcollet O., Georges A. et Millis A.J., « Momentum-space anisotropy and pseudogaps: A comparative cluster dynamical mean-field analysis of the doping-driven metal-insulator transition in the two-dimensional Hubbard model », *Phys. Rev., B* 82, 2010, 155101.

Hanke W., Kiesel M.L., Aichhorn M., Brehm S. et Arrighoni E., « The 3-band Hubbard-model versus the 1-band model for the high- $T_c$  cuprates: Pairing dynamics, superconductivity and the ground-state phase diagram », *European Physical Journal Special Topics* 188, 2010, 15-32.

Jördens R., Tarruell L., Greif D., Uehlinger T., Strohmaier N., Moritz H., Esslinger T., De Leo L., Kollath C., Georges A., Scarola V., Pollet L., Burovski E., Kozik E. et Troyer M., « Quantitative Determination of Temperature in the Approach to Magnetic Order of Ultracold Fermions in an Optical Lattice », *Phys. Rev. Lett.*, 104(18), 2010, 180401.

Kollath C., Roux G., Biroli G. et Läuchli A.M., « Statistical properties of the spectrum of the extended BoseHubbard model », *Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment*, 8, 2010, 11.

Martins C., Aichhorn M., Vaugier L. et Biermann S., « Reduced effective spin-orbital degeneracy and spin-orbital ordering in paramagnetic transition metal oxides:  $\text{Sr}_2\text{IrO}_4$  vs.  $\text{Sr}_2\text{RhO}_4$  », *ArXiv e-prints*, 2011, 1107.1371.

de'Medici L., Mravlje J. et Georges A., « Janus-faced influence of the Hund's rule coupling in strongly correlated materials », *ArXiv e-prints*, 2011, 1106.0815.

Mravlje J., Aichhorn M. et Georges A., « Origin of the high Neel temperature in  $\text{SrTcO}_3$  », *ArXiv e-prints*, 2011, 1108.1168.

Mravlje J., Aichhorn M., Miyake T., Haule K., Kotliar G. et Georges A., « Coherence-Incoherence Crossover and the Mass-Renormalization Puzzles in  $\text{Sr}_2\text{RuO}_4$  », *Phys. Rev. Lett.*, 106, 2011, 096401.

Nascimbène S., Navon N., Pilati S., Chevy F., Giorgini S., Georges A. et Salomon C., « Fermi-Liquid Behavior of the Normal Phase of a Strongly Interacting Gas of Cold Atoms », *Phys. Rev. Lett.* 106, 2011, 215303.

Ortenzi L., Biermann S., Andersen O.K., Mazin I.I. et Boeri L., « Competition between electron-phonon coupling and spin fluctuations in superconducting hole-doped  $\text{CuBiSO}$  », *Phys. Rev., B* 83, 2011, 100505.

Peil O.E., Georges A. et Lechermann F., « Strong correlations enhanced by charge-ordering in highly doped cobaltates », *ArXiv e-prints*, 2011, 1107.4374.

Peter Barmettler J.-S.B. et Kollath C., « Lattice heat destroys coherence », *Physics*, 3, 2010, 102.

Piefke C., Boehnke L., Georges A. et Lechermann F., « Considerable nonlocal electronic correlations in strongly doped  $\text{Na}_x\text{CoO}_2$  », *Phys. Rev., B* 82, 2010, 165118.

Poletti D. et Kollath C., « Slow quench dynamics of periodically driven quantum gases », *Phys. Rev., A* 84, 2011, 013615.

Tomczak J.M., Haule K., Miyake T., Georges A. et Kotliar G., « Thermopower of correlated semiconductors: Application to  $\text{FeAs}_2$  and  $\text{FeSb}_2$  », *Phys. Rev., B* 82(8), 2010, 085104.

Werner P., Casula M., Miyake T., Aryasetiawan F., Millis A.J. et Biermann S., « Satellites and large doping- and temperature-dependence of electronic properties in hole-doped  $\text{BaFe}_2\text{As}_2$  », *ArXiv e-prints*, 2011, 1107.3128.