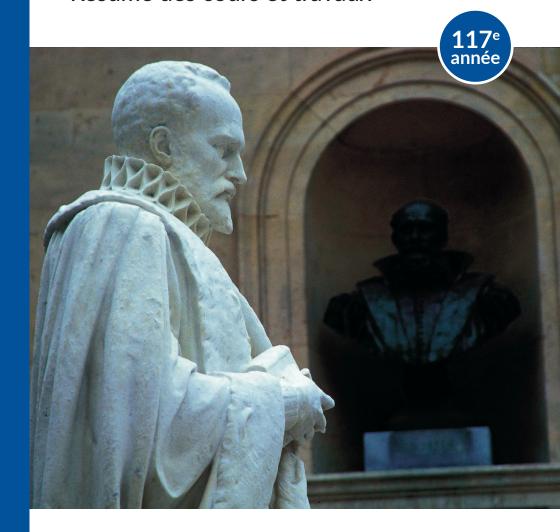
ANNUAIRE du **COLLÈGE DE FRANCE** 2016-2017

Résumé des cours et travaux





PHYSIQUE DE LA MATIÈRE CONDENSÉE

Antoine GEORGES

Membre de l'Institut (Académie des sciences), professeur au collège de France

Mots-clés : physique quantique, physique théorique, matière condensée

La série de cours et séminaires « Contrôler les fonctionnalités des oxydes : hétérostructures, impulsions lumineuses » est disponible, en audio et/ou en vidéo, sur le site internet du Collège de France (https://www.college-de-france.fr/site/antoine-georges/course-2016-2017.htm).

ENSEIGNEMENT

COURS - CONTRÔLER LES FONCTIONNALITÉS DES OXYDES : HÉTÉROSTRUCTURES, IMPULSIONS LUMINEUSES

La découverte et la compréhension de nouveaux états électroniques collectifs est l'un des objectifs fondamentaux de la physique de la matière condensée. Par la diversité et l'originalité de leurs propriétés (ferroélectricité, magnétisme, supraconductivité, transitions métal-isolant, etc.), les oxydes de métaux de transition sont des matériaux de choix dans cette entreprise. Outre les questions fondamentales qu'elles soulèvent, ces propriétés sont autant de fonctionnalités qui sont ou pourraient être exploitées en vue d'applications, aux technologies numériques ou de l'énergie par exemple. Ces matériaux se caractérisent également par une compétition serrée entre différentes phases, ce qui constitue à la fois une opportunité et un défi pour le contrôle de leurs fonctionnalités. Depuis une quinzaine d'années, ce domaine a été profondément renouvelé par la fabrication de matériaux épitaxiés et d'hétérostructures de grande qualité structurale, offrant de nouvelles voies de contrôle, et permettant de combiner les fonctionnalités de matériaux différents ou de faire apparaître des propriétés nouvelles. L'utilisation d'impulsions lumineuses offre une autre possibilité de contrôle originale. Le cours a donné une vue générale de ce domaine très vaste, tout en présentant certains aspects plus en détail.

Les deux premiers cours ont été consacrés à une vue d'ensemble du domaine, puis a une introduction aux aspects structuraux de ces matériaux, et à leur structure électronique. Les cours suivants ont abordé : les nickelates de terre rares RNiO₃, le contrôle des degrés de liberté orbitaux dans ces matériaux (dans l'espoir de réaliser un « supraconducteur synthétique ») et la vaste famille des ruthénates. Un dernier cours a abordé le contrôle sélectif de la structure de ces matériaux par des impulsions lumineuses résonantes (phononique non-linéaire).

SÉMINAIRES

Jean-Marc Triscone (DQMP, université de Genève) – Interfacial effects and superconductivity in oxide heterostructures; Alexandre Gloter et Odile Stephan (LPS, Orsay) – Explorer la physique aux interfaces d'oxydes fortement corrélés: résultats récents et perspectives en microscopie électronique; Marcelo Rozenberg (LPS, Orsay) – Transition-metal oxides under strong electric fields, from resistive switching to artificial synapses and neurons; Andres Santander-Syro (CSNSM, Orsay) – Novel two-dimensional electron systems at the surface of transition-metal oxides; Darrell Schlom (Cornell University) – Thin Film Alchemy: Using Epitaxial Engineering to Unleash the Hidden Properties of Oxide; Manuel Bibes (CNRS-Thales) – Electric-field control of magnetism in oxide heterostructures; Olle Eriksson (Uppsala) – Data-mining approaches to find new materials.

ENSEIGNEMENT À L'ÉTRANGER

Trois cours au Max Planck Institute for the Structure and Dynamics of Matter (Hamburg, Allemagne) en janvier 2017.

ORGANISATION DE COLLOQUES ET RENCONTRES EN 2016-2017

- 6 septembre 2016 : rencontre entre les équipes de chaire « Physique de la matière condensée » et « Chimie des processus biologiques », Fondation Hugot.
- 5-7 octobre 2016 : conférence conjointe avec le programme « Quantum Materials » du CIFAR (Canada), au Collège de France.
- 1^{er}-4 novembre 2016: symposium de la collaboration ERC-QMAC Venise, Italie (organisateurs: A. Cavalleri, D. Jaksch, A. Georges, J.-M. Triscone).
- 3 février 2017 : rencontre de la collaboration ERC-QMAC Fondation Hugot (organisateurs : A. Cavalleri, D. Jaksch, A. Georges, J.-M. Triscone).
- 31 mai-2 juin 2017 : rencontre internationale annuelle de la librairie numérique « TRIQS Toolbox for Research on Interacting Quantum Systems », Collège de France (organisateur : M. Ferrero).
- 12-13 juin 2017 : rencontre au Collège de France entre l'équipe de la chaire et l'équipe du professeur Olle Eriksson (Uppsala).
- 3-4 juillet 2017 : rencontre de la collaboration ERC-QMAC Genève, Suisse (organisateurs : A. Cavalleri, D. Jaksch, A. Georges, J.-M. Triscone).

RECHERCHE – MATIÈRE QUANTIQUE À FORTES CORRÉLATIONS

Les recherches menées dans l'équipe concernent la « matière quantique à fortes corrélations ». Il s'agit de systèmes constitués d'un très grand nombre de particules indiscernables (les électrons d'un solide ou les atomes d'un gaz ultra-froid par exemple) ayant entre elles de fortes interactions. Pour ces systèmes, une description théorique en termes de fonctions d'ondes indépendantes est insuffisante. Le développement de nouvelles méthodes théoriques, analytiques et computationnelles, permettant de comprendre la physique de ces systèmes est au cœur des activités de notre équipe, ainsi que les applications de ces méthodes à des questions de physique des matériaux ou aux propriétés d'autres systèmes quantiques en interaction.

En 2016-2017, les principales directions poursuivies au sein de ce domaine général ont été les suivantes.

1) Développements algorithmiques

Une nouvelle méthode permettant de pousser les algorithmes de « Monte-Carlo diagrammatique » dans un régime de température jusqu'alors inaccessible (Wu *et al.*, 2016) a été développée. En collaboration avec l'équipe d'Olivier Parcollet (IPhT-CEA-Saclay), notre équipe (Michel Ferrero) participe au développement de la librairie de codes *open-source* TRIQS « Toolbox for Research on Interacting Quantum Systems » (Aichhorn *et al.*, 2016 ; Seth *et al.*, 2016).

2) Transport dans les métaux incohérents en l'absence de quasiparticules

Un sujet de grande actualité est le comportement de certains systèmes conducteurs dans lesquels la cohérence des quasi-particules est détruite par les fluctuations quantiques. L'étude théorique de ces systèmes a révélé d'intéressantes connections avec la physique des trous noirs (correspondance holographique). Nous avons effectué en 2016-2017 deux types de travaux sur ce sujet. D'une part, l'étude contrôlée des fonctions de réponse optique et du transport dans le modèle de Hubbard aux très hautes températures (Perepelitsky et *al.*, 2016) et, d'autre part, l'étude du transport thermoélectrique dans le modèle de Sachdev-Ye-Kitaev (SYK) (Davison *et al.*, 2017).

3) Contrôle des solides par des impulsions Téra-Hertz et supraconductivité induite par la lumière

Une direction de recherche particulièrement originale s'est développée depuis quelques années, cherchant à contrôler les fonctionnalités d'un matériau en excitant de manière sélective certains modes structuraux par des impulsions lumineuses Téra-Hertz en résonance avec ces modes. Les expériences pionnières menées par Andrea Cavalleri (MPI Hamburg) et ses collaborateurs ont montré qu'il est possible de changer de manière transitoire la structure du matériau, induisant par exemple une transition isolant-métal, ou plus récemment augmentant ainsi la cohérence d'un matériau supraconducteur. Cette direction de recherche est au cœur du programme « Frontiers in Quantum Materials Control » (ERC Synergy Q-MAC) dont notre équipe est l'un des quatre partenaires.

En 2016-2017, notre équipe a poursuivi de nombreux travaux dans ce domaine (Sentef *et al.*, 2017; Mazza *et al.*, 2017). Nous avons en particulier montré (Mazza et Georges, 2017) que le mécanisme proposé dans Kim *et al.* (2016) pour expliquer la supraconductivité induite par la lumière dans le solide organique K_3C_{60} continue d'être efficace lorsqu'on étudie le comportement d'un système hors d'équilibre. Nous avons également proposé un mécanisme différent, qui consiste en un processus de refroidissement effectif des quasi-particules dans ce système (Nava *et al.*, *Nature Physics*, vol. 14, nº 154, 2018).

INFORMATIONS SUR L'ÉQUIPE DE RECHERCHE

L'équipe de recherche « Matériaux quantiques à fortes corrélations » est implantée au sein de l'Institut de physique du Collège de France (Bâtiment E). L'équipe est rattachée au Centre de physique théorique (CPHT, CNRS UMR-7644), École polytechnique et université Paris-Saclay.

Membres de l'équipe de chaire (2016-2017): Silke Biermann, Michel Ferrero, Antoine Georges, Leonid Pourovskii (permanents CPHT, École polytechnique); Mickael Pasek (ATER, Collège de France); Oscar Akerlund, Giacomo Mazza, Oleg Peil, Edward Perepelitsky, Minjae Kim, Alaska Subedi, Wei Wu (postdoctorants); Pascal Delange, Alice Moutenet (doctorants). Membres associés à l'équipe de chaire: Olivier Parcollet, Francesco Peronaci, Jaksa Vucicevic, Nils Wentzell (IPhT-CEA), Indranil Paul (LMPQ, université Paris-Diderot).

L'équipe de chaire est membre fondateur de trois réseaux collaboratifs internationaux :

- le projet ERC-Synergy QMAC «Frontiers in Quantum Materials Control »,
 Hambourg-Genève-Oxford-Paris (A. Georges et postdocs);
- la « Simons Collaboration on the Many-Electron Problem » financée par la Simons Foundation (M. Ferrero, A. Georges);
- le Centre national de compétences en recherche NCCR-MARVEL « Materials Revolution : Computational Design and Discovery of Novel Materials », sous l'égide de la Fondation nationale suisse pour la science (O. Peil et A. Georges. dans le cadre d'une affiliation à temps partiel à l'université de Genève).

Antoine Georges est de plus membre du conseil scientifique du programme « Quantum Materials » de la Fondation canadienne pour la recherche avancée (CIFAR), qui a des liens de collaboration avec plusieurs équipes de chaire du Collège. Notre équipe fait également partie d'un laboratoire international associé (LIA) CNRS-université de Sherbrooke.

De nombreux travaux de notre équipe de recherche s'inscrivent par ailleurs dans le cadre de collaborations, avec des équipes théoriques ou expérimentales. En 2016-2017, ces collaborations ont impliqué principalement les institutions suivantes : IPhT, CEA-Saclay (O. Parcollet), Institut d'optique Graduate School (L. Sanchez-Palencia et A. Aspect), université de Genève (J.-M. Triscone, D. van der Marel, F. Baumberger), université de Bonn (C. Kollath), Institut Joszef Stefan, Ljubljana (J. Mravlje), Max Planck Institute for Structural Dynamics, Hambourg (A. Cavalleri, M. Sentef), King's College London (E. Kozik), University of California, UC-Santa Cruz (B.S. Shastry), université de Linköping, Suède (I. Abrikosov), université de Graz, Autriche (M. Aichhorn), SISSA, Trieste, Italie (M. Capone et M. Fabrizio), université de Sherbrooke, Canada (L. Taillefer).

PUBLICATIONS

2017

AYRAL T., BIERMANN S., WERNER P., BOEHNKE L., « Influence of Fock exchange in combined many-body perturbation and dynamical mean field theory », *Physical Review B*, vol. 95, n° 24, 2017, 245130, DOI: 10.1103/PhysRevB.95.245130.

CROSNIER DE BELLAISTRE C., ASPECT A., GEORGES A. et SANCHEZ-PALENCIA L., « Effect of a bias field on disordered waveguides: Universal scaling of conductance and application to ultracold atoms », *Physical Review B*, vol. 95, nº 14, 2017, 140201(R), DOI: 10.1103/ PhysRevB.95.140201 [arXiv:1609.08406].

DAVISON R.A., FU W., GEORGES A., GU Y., JENSEN K. et SACHDEV S., « Thermoelectric transport in disordered metals without quasiparticles: The Sachdev-Ye-Kitaev models and holography », *Physical Review B*, vol. 95, no 15, 2017, 155131, DOI: 10.1103/PhysRevB.95.155131 [arXiv:1612.00849].

DELANGE P., BIERMANN S., MIYAKE T., POUROVSKII L., « Crystal-field splittings in rare-earth-based hard magnets: An ab initio approach », *Physical Review B*, vol. 96, no 15, 2017, 155132, DOI: 10.1103/PhysRevB.96.155132.

DOIRON-LEYRAUD N. *et al.*, « Pseudogap phase of cuprate superconductors confined by Fermi surface topology », *Nature Communications*, vol. 8, nº 2044, 2017, DOI: 10.1038/s41467-017-02122-x.

FINK J., RIENKS E.D.L., THIRUPATHAIAH S., NAYAK J., VAN ROEKEGHEM A., BIERMANN S. *et al.*, « Experimental evidence for importance of Hund's exchange interaction for incoherence of charge carriers in iron-based superconductors », *Physical Review B*, vol. 95, no 14, 2017, 144513, DOI: 10.1103/PhysRevB.95.144513.

HIRAYAMA M., MIYAKE T., IMADA M., BIERMANN S., « Low-energy effective Hamiltonians for correlated electron systems beyond density functional theory », *Physical Review B*, vol. 96, no 7, 2017, 075102, DOI: 10.1103/PhysRevB.96.075102.

HORVAT A., POUROVSKII L., AICHHORN M., MRAVLJE J., «Theoretical prediction of antiferromagnetism in layered perovskite Sr2TcO4 », *Physical Review B*, 2017, vol. 95, no 20, 205115, DOI: 10.1103/PhysRevB.95.205115.

MARTINS C., AICHHORN M., BIERMANN S., « Coulomb correlations in 4d and 5d oxides from first principles-or how spin-orbit materials choose their effective orbital degeneracies », *Journal of Physics-Condensed Matter*, vol. 29, no 26, 2017, 263001, DOI: 10.1088/1361-648X/aa648f.

MATSUYAMA K., PEREPELITSKY E., SHASTRY B.S., « Origin of kinks in the energy dispersion of strongly correlated matter », *Physical Review B*, vol. 95, no 16, 2017, 165435, DOI: 10.1103/PhysRevB.95.165435.

MAZZA G., « From sudden quench to adiabatic dynamics in the attractive Hubbard model », <code>Physical Review B</code>, vol. 96, no 20, 2017, 205110, DOI : 10.1103/PhysRevB.96.205110.

MAZZA G. et GEORGES A., « Non-equilibrium superconductivity in driven alkali-doped fullerides », *Physical Review B*, vol. 96, no 6, 2017, 064515, DOI: 10.1103/PhysRevB.96.064515.

PANDA S.K., JIANG H., BIERMANN S., «Pressure dependence of dynamically screened Coulomb interactions in NiO: Effective Hubbard, Hund, intershell, and intersite components », *Physical Review B*, vol. 96, no 4, 2017, 045137, DOI: 10.1103/PhysRevB.96.045137.

PASEK M., ORSO G. et DELANDE D., « Anderson localization of ultracold atoms: Where is the mobility edge? », *Physical Review Letters*, 2017, vol. 118, no 17, 170403, DOI: 10.1103/ PhysRevLett.118.170403, [arXiv:1609.01065].

POUROVSKII L.V., MRAVLJE J., GEORGES A., SIMAK S.I. et ABRIKOSOV I.A., « Electron-electron scattering and thermal conductivity of epsilon-iron at Earth's core conditions », *New Journal of Physics*, vol. 19, no 7, 2017, 073022, DOI: 10.1088/1367-2630/aa76c9 [arXiv:1603.02287].

RICHARD P., VAN ROEKEGHEM A., Lv BQ, QIAN T., KIM T.K., HOESCH M., *et al.*, « Is BaCr₂As₂ symmetrical to BaFe₂As₂ with respect to half 3d shell filling? », *Physical Review B*, vol. 95, no 18, 2017, 184516, DOI: 10.1103/PhysRevB.95.184516.

RUPPEN J., TEYSSIER J., ARDIZZONE I., PEIL O.E., CATALANO S., GIBERT M., TRISCONE J.-M., GEORGES A. et VAN DER MAREL D., « Impact of antiferromagnetism on the optical properties of rare earth nickelates », *Physical Review B*, vol. 96, no 4, 2017, 045120, DOI: 10.1103/ PhysRevB.96.045120 [arXiv:1702.00601].

SENTEF M.A., TOKUNO A., GEORGES A. et KOLLATH C., «Theory of laser-controlled competing superconducting and charge orders », *Physical Review Letters*, vol. 118, nº 8, 2017, 087002, DOI: 10.1103/PhysRevLett.118.087002 [arXiv:1611.04307].

SETH P., HANSMANN P., van ROEKEGHEM A., VAUGIER L., BIERMANN S., « Towards a first-principles determination of effective coulomb interactions in correlated electron materials: Role of intershell interactions », *Physical Review Letters*, vol. 119, no 5, 2017, 056401, DOI: 10.1103/PhysRevLett.119.056401.

SUBEDI A., « Midinfrared-light-induced ferroelectricity in oxide paraelectrics via nonlinear phononics », *Physical Review B*, vol. 95, nº 13, 2017, 134113, DOI: 10.1103/ PhysRevB.95.134113 [arXiv:1612.04788].

SUBEDI A., « Modulated, three-directional, and polar structural instability in layered d(1) NaTiO₂ », *Physical Review B*, vol. 95, no 19, 2017, 195149, DOI: 10.1103/PhysRevB.95.195149.

SUBEDI A., « Mott-to-Goodenough insulator-insulator transition in LiVO₂ », *Physical Review B*, vol. 95, no 21, 2017, 214119, DOI: 10.1103/PhysRevB.95.214119.

SUBEDI A., « Proposal for midinfrared light--induced ferroelectricity in oxide paraelectrics », *Physical Review B*, vol. 95, nº 13, 2017, 134113, DOI: 10.1103/PhysRevB.95.134113 [arXiv:1612.04788]

Sutter D., Fatuzzo C.G., Moser S., Kim M., Fittipaldi R., Vecchione A., Granata V., Sassa Y., Cossalter F., Gatti G., Grioni M., Rønnow H.M., Plumb N.C., Matt C.E., Shi M., Hoesch M., Kim T.K., Chang T.-R., Jeng H.-T., Jozwiak C., Bostwick A., Rotenberg E., Georges A., Neupert T. et Chang J., « Hallmarks of Hunds coupling in the Mott insulator Ca_2RuO_4 », *Nature Communications*, 2017, vol. 8, 15176, DOI: 10.1038/ncomms15176 [arXiv:1610.02854].

WU W., FERRERO M., GEORGES A. et KOZIK E., «Controlling Feynman diagrammatic expansions: physical nature of the pseudo gap in the two-dimensional Hubbard model », *Physical Review B*, vol. 96, nº 4, 2017, 041105(R), DOI: 10.1103/PhysRevB.96.041105 [arXiv:1608.08402].

2016

AICHHORN M., POUROVSKII L., SETH P., VILDOSOLA V., ZINGL M., PEIL O.E., DENG X., MRAVLJE J., KRABERGER G.J., MARTINS C., FERRERO M. et PARCOLLET O., «TRIQS/DFTTools: A TRIQS application for ab initio calculations of correlated materials », *Computer Physics Communications*, vol. 204, 2016, p. 200-208, DOI: 10.1016/j.cpc.2016.03.014 [arXiv:1511.01302].

DELANGE P., AYRAL T., SIMAK S.I., FERRERO M., PARCOLLET O., BIERMANN S. et POUROVSKII L., « Large effects of subtle electronic correlations on the energetics of vacancies in α -Fe », *Physical Review B*, vol. 94, no 10, 2016, 100102, DOI: 10.1103/PhysRevB.94.100102 [arXiv:1606.05121].

GEORGES A., «The beauty of impurities: Two revivals of Friedel's virtual bound-state concept », *Comptes Rendus Physique*, vol. 17, nº 3, 2016, p. 430-446, DOI: 10.1016/j. crhy.2015.12.005.

Grenier C., Kollath C. et Georges A., « Thermoelectric transport and Peltier cooling of cold atomic gases », *Comptes Rendus Physique*, vol. 17, no 10, 2016, p. 1161-1174, DOI: 10.1016/j.crhy.2016.08.013 [arXiv:1607.03641].

HANSMANN P., AYRAL T., TEJEDA A., BIERMANN S., « Uncertainty principle for experimental measurements: Fast versus slow probes », *Scientific reports*, vol. 6, no 19728, 2016, DOI: 10.1038/srep19728.

KIM M., NOMURA Y., FERRERO M., SETH P., PARCOLLET O. et GEORGES A., « Enhancing superconductivity in A3C60 fullerides », *Physical Review B : Condensed matter and materials physics*, vol. 94, no 15, 2016, 155152, DOI: 10.1103/PhysRevB.94.155152 [arXiv:1606.05796].

MAZZA G., AMARICCI A., CAPONE M. et FABRIZIO M., « Field-driven mott gap collapse and resistive switch in correlated insulators », *Physical Review Letters*, vol. 117, no 17, 2016, 176401, DOI: 10.1103/PhysRevLett.117.176401 [arXiv:1602.03138].

PEREPELITSKY E., GALATAS A., MRAVLJE J., ŽITKO R., KHATAMI E., SHASTRY B.S. et GEORGES A., « Transport and optical conductivity in the hubbard model : A high-temperature expansion perspective », *Physical Review B*, vol. 94, n° 23, 2016, 235115, DOI : 10.1103/ PhysRevB.94.235115 [arXiv:1608.01600].

POUROVSKII L.V., « Two-site fluctuations and multipolar intersite exchange interactions in strongly correlated systems », *Physical Review B*, vol. 94, no 11, 2016, 115117, DOI: 10.1103/ PhysRevB.94.115117 [arXiv:1512.03394]

SENTEF M.A., KEMPER A.F., GEORGES A. et KOLLATH C., «Theory of light-enhanced phonon-mediated superconductivity », *Physical Review B*, vol. 93, no 14, 2016, 144506, DOI: 10.1103/PhysRevB.93.144506.

SETH P., KRIVENKO I., FERRERO M. et PARCOLLET O., « TRIQS/CTHYB: A continuous-time quantum Monte Carlo hybridization expansion solver for quantum impurity problems », *Computer Physics Communications*, vol. 200, 2016, p. 274-284, DOI: 10.1016/j. cpc.2015.10.023 [arXiv:1507.00175].

SHASTRY B.S., PEREPELITSKY E., «Low-energy physics of the t–J model in $d = \infty$ using extremely correlated Fermi liquid theory: Cutoff second-order equations », *Physical Review B*, vol. 94, n° 4, 2016, 045138, DOI: 10.1103/PhysRevB.94.045138.

VAN ROEKEGHEM A., VAUGIER L., JIANG H., BIERMANN S., « Hubbard interactions in iron-based pnictides and chalcogenides: Slater parametrization, screening channels, and frequency dependence », *Physical Review B*, vol. 94, nº 12, 2016, 125147, DOI: 10.1103/ PhysRevB.94.125147.