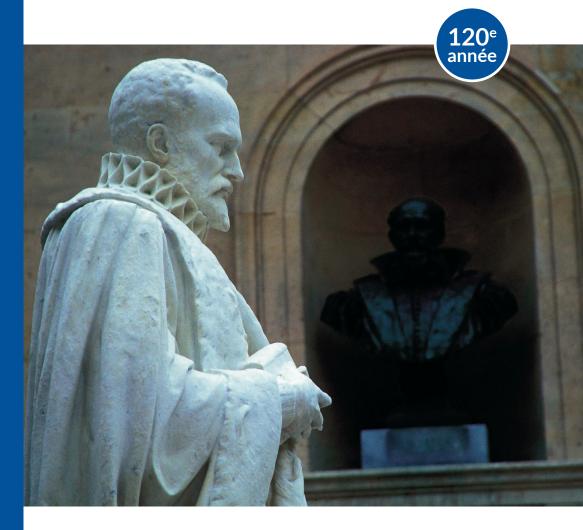
ANNUAIRE du **COLLÈGE DE FRANCE** 2019-2020

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: matière, matériaux quantiques, physique quantique computationnelle

Le cours, les séminaires et le colloque « Les conducteurs organiques bidimensionnels », prévus en mai-juin 2020, n'ont malheureusement pas pu avoir lieu en raison de la situation liée au Covid-19.

Cours et séminaires

Les systèmes quantiques constitués d'un très grand nombre de fermions en interaction – électrons dans un matériau ou fluides quantiques comme les gaz ultra-froids – présentent des phénomènes collectifs fascinants. Dès 1929, dans un article que l'on peut considérer comme la date de naissance du « problème à *N* corps quantique », P. Dirac a souligné la nécessité de développer des méthodes théoriques permettant de comprendre et prédire les propriétés de ces systèmes. Ce programme de recherche associe aujourd'hui de manière étroite des aspects conceptuels et computationnels/algorithmiques. Le cours de l'an dernier (2018-2019) constituait une introduction à la « théorie de champ moyen dynamique » (DMFT) qui a permis des progrès notables dans ce domaine. Celui de 2019-2020 prévoyait d'aborder les extensions et généralisations de cette approche, indispensables pour prendre en compte les corrélations et fluctuations spatiales. Celles-ci jouent un rôle essentiel en particulier pour les matériaux bidimensionnels.

Le cours, les séminaires (orateurs prévus : Dieter Vollhardt, Thomas Schäfer, Philipp Hansmann, Giulio Biroli) et le colloque sur « Les conducteurs organiques bidimensionnels », prévus en mai-juin 2020, n'ont malheureusement pas pu avoir lieu en raison de la situation liée au Covid-19.

A. GEORGES, « Physique de la matière condensée », Annuaire du Collège de France 2019-2020. Résumé des cours et travaux, 120° année, Paris, Collège de France, 2023, p. 73-76, https://doi.org/10.4000/annuaire-cdf.18154.

RECHERCHE

MATIÈRE QUANTIQUE À FORTES CORRÉLATIONS

Les recherches menées par l'équipe de la chaire concernent les systèmes constitués d'un très grand nombre de particules (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 pour comprendre ces systèmes est au cœur de nos activités. En 2019-2020, ces développements ont porté en particulier sur le développement des méthodes de Monte-Carlo diagrammatiques (Michel Ferrero, Fedor Šimkovic; thèse de Alice Moutenet soutenue en 2020). Nous nous sommes également intéressés aux algorithmes de type « Machine learning » (Robledo-Moreno *et al.*, 2020). Notre équipe participe au développement de la librairie de codes *open-source* TRIQS (*Toolbox for research on interacting quantum systems* ¹).

Nous appliquons ces méthodes à des modèles comme le modèle de Hubbard (Wu *et al.*, 2020) ou le modèle de Sachdev-Ye-Kitaev (Cha *et al.*, 2020), et à des questions de physique des matériaux. En 2019-2020 ces applications ont concerné en particulier les propriétés du fer sous pressions géophysiques, le calcul des couplages d'échange dans les matériaux magnétiques, et la physique des composés de terres rares et d'actinides (Leonid Pourovskii), ainsi que les oxydes de métaux de transition et leurs hétérostructures (nickelates RNiO₃ et ruthénate Sr₂RuO₄ en particulier). Notre équipe s'intéresse également au couplage fort entre lumière et degrés de liberté internes d'un matériau (électrons, phonons, excitons) dans des cavités optiques (Giacomo Mazza).

INFORMATIONS SUR L'ÉQUIPE DE RECHERCHE

L'équipe de recherche « Matière quantique 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), à l'École polytechnique (IP-Paris).

Membres de l'équipe de chaire (2019-2020) : Steffen Backes, Silke Biermann, Michel Ferrero, Antoine Georges, Leonid Pourovskii, Alaska Subedi (permanents CPHT) ; Hanhim Kang, Giacomo Mazza, Thomas Schäfer, Fedor Šimkovic (postdoctorants CPHT) ; Alice Moutenet (doctorante).

Membres associés à l'équipe de chaire : Indranil Paul (LMPQ, université Paris-Diderot), Luca de'Medici (ESPCI).

PUBLICATIONS

Louat A., Lenz B., Biermann S., Martins C., Bertran F., Le Fèvre P., Rault J.E., Bert F. et Brouet V., « ARPES study of orbital character, symmetry breaking, and pseudogaps in doped and pure $\rm Sr_2IrO_4$ », *Physical Review B*, vol. 100, n° 20, 2019, art. 205135, https://doi.org/10.1103/PhysRevB.100.205135.

^{1.} Voir: https://triqs.github.io/triqs/latest.

- STEINBAUER J., BIERMANN S. et BHANDARY S., « Role of charge transfer in hybridization-induced spin transition in metal-organic molecules », *Physical Review B*, vol. 100, 2019, art. 245418, https://doi.org/10.1103/PhysRevB.100.245418 [arXiv:1912.01951].
- SUN C., RAY U., CUI Z.-H., STOUDENMIRE M., FERRERO M. et KIN-LIC CHAN G., «Finite temperature density matrix embedding theory», *Physical Review B*, vol. 101, 2019, art. 075131 [arXiv:1911.07439].
- VUCICEVIC J. et FERRERO M., « Real-frequency diagrammatic Monte Carlo at finite temperature », *Physical Review B*, vol. 101, nº 7, 2020, art. 075113, https://doi.org/10.1103/PhysRevB.101.075113 [arXiv: 1908.11826].
- BUZZI M., NICOLETTI D., FECHNER M., TANCOGNE-DEJEAN N., SENTEF M.A., GEORGES A., DRESSEL M., HENDERSON A., SIEGRIST T., SCHLUETER J.A., MIYAGAWA K., KANODA K., NAM M.-S., ARDAVAN A., COULTHARD J., TINDALL J., SCHLAWIN F., JAKSCH D., et CAVALLERI A., « Photo-molecular high temperature superconductivity », *Physical Review X*, vol. 10, n° 3, 2020, art. 031028, https://doi.org/10.1103/PhysRevX.10.031028.
- CHA P., WENTZELL N., PARCOLLET O., GEORGES A. et KIM E.-A., « Linear resistivity and Sachdev-Ye-Kitaev (SYK) spin liquid behavior in a quantum critical metal with spin-1/2 fermions », *Proceedings of the National Academy of Science of the USA*, vol. 117, no 31, 2020, p. 18341-18346, https://doi.org/10.1073/pnas.2003179117.
- DOMINGUEZ C., GEORGESCU A.B., MUNDET B., ZHANG Y., FOWLIE J., MERCY A., CATALANO S., ALEXANDER D.T.L., GHOSEZ P., GEORGES A., MILLIS A.J., GIBERT M. et TRISCONE J.-M., « Length-scales of interfacial coupling between metal-insulator phases in oxides », *Nature Materials*, vol. 19, no 11, 2020, p. 1182-1187, https://doi.org/10.1038/s41563-020-0757-x.
- HAO H., GEORGES A., MILLIS A.J., RUBENSTEIN B., HAN Q. et SHI H., « Metal-insulator and magnetic phase diagram of Ca₂RuO₄ from auxiliary field quantum Monte Carlo and Dynamical Mean Field Theory », *Physical Review B*, vol. 101, no 13, 2020, art. 235110, https://doi.org/10.1103/PhysRevB.101.235110.
- JOSHI D.G., LI C., TARNOPOLSKY G., GEORGES A. et SACHDEV S., « Deconfined critical point in a doped random quantum Heisenberg magnet », *Physical Review X*, vol. 10, no 2, 2020, art. 021033, https://doi.org/10.1103/PhysRevX.10.021033.
- KLEEORIN Y., THIERSCHMANN H., BUHMANN H., GEORGES A., MOLENKAMP L.W. et MEIR Y., « How to measure the entropy of a mesoscopic system via thermoelectric transport », *Nature Communications*, vol. 10, 2019, art. 5801, https://doi.org/10.1038/s41467-019-13630-3.
- KUGLER F.B., ZINGL M., STRAND H.U.R., LEE S.-S. B., VON DELFT J. et GEORGES A., « Strongly correlated materials from a numerical renormalization group perspective: How the Fermi-liquid state of Sr_2RuO_4 emerges », *Physical Review Letters*, vol. 124, 2020, art. 016401, https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.124.016401.
- LI J., GOLEŽ D., MAZZA G., MILLIS A.J., GEORGES A. et ECKSTEIN M., « Electromagnetic coupling in tight-binding models for strongly correlated light and matter », *Physical Review B*, vol. 101, nº 20, 2020, art. 205140, https://doi.org/10.1103/PhysRevB.101.205140.
- MAZZA G., RÖSNER M., WINDGÄTTER L., LATINI S., HÜBENER H., MILLIS A.J., RUBIO A. et GEORGES A., « Nature of symmetry breaking at the excitonic insulator transition: Ta_2NiSe_5 », *Physical Review Letters*, vol. 124, no 19, 2020, art. 197601, https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.124.197601.
- PILEMALM R., POUROVSKII L., MOSYAGIN I., SIMAK S. et EKLUND P., « Thermodynamic stability, thermoelectric, elastic and electronic structure properties of ScMN₂-Type (M = V, Nb, Ta) phases studied by ab initio calculations », *Condensed Matter*, vol. 4, n° 36, 2019, https://doi.org/10.3390/condmat4020036.

POUROVSKII L.V., MRAVLJE J., POZZO M. et ALFÈ D., « Electronic correlations and transport in iron at Earth's core conditions », *Nature Communications*, vol. 11, 2020, art. 4105, https://doi.org/10.1038/s41467-020-18003-9.

POUROVSKII L.V., BOUST J., BALLOU R., GOMEZ ESLAVA G. et GIVORD D., « Higher-order crystal field and rare-earth magnetism in rare-earth– Co_5 intermetallics », *Physical Review B*, vol. 101, no 21, 2020, art. 214433, https://doi.org/10.1103/PhysRevB.101.214433.

POUROVSKII L.V., « Electronic correlations in dense iron: From moderate pressure to Earth's core conditions », *Journal of Physics: Condensed Matter*, vol. 31, 2019, art. 373001, https://doi.org/10.1088/1361-648x/ab274f.

POUROVSKII L.V. et KHMELEVSKYI S., « Quadrupolar superexchange interactions, multipolar order, and magnetic phase transition in UO₂», *Physical Review B*, vol. 99, n° 9, 2019, art. 094439, https://doi.org/10.1103/PhysRevB.99.094439.

ROBLEDO-MORENO J. R., CARLEO G. et GEORGES A., « Deep learning the Hohenberg-Kohn maps of density functional theory », *Physical Review Letters*, vol. 125, no 7, 2020, art. 076402, https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.125.076402.

SUN C., RAY U., CUI Z.-H., STOUDENMIRE M., FERRERO M. et CHAN G.K.-L., « Finite-temperature density matrix embedding theory », *Physical Review B*, vol. 101, no 7, 2020, art. 075131, https://doi.org/10.1103/PhysRevB.101.075131 [arXiv:1911.07439].

SUNKO V., MAZZOLA F., KITAMURA S., KHIM S., KUSHWAHA P., CLARK O.J., WATSON M., MARKOVIC I., BISWAS D., POUROVSKII L., KIM T.K., LEE T.L., THAKUR P.K., ROSNER H., GEORGES A., MOESSNER R., OKA T., MACKENZIE A.P. et King P.D.C., « Probing spin correlations using angle resolved photoemission in a coupled metallic/Mott insulator system », *Science Advances*, vol. 6, no 6, 2020, https://doi.org/10.1126/sciadv.aaz0611.

VUČIČEVIĆ J. et FERRERO M., «Real-frequency diagrammatic Monte Carlo at finite temperature », *Physical Review B*, vol. 101, nº 7, 2020, art. 075113, https://doi.org/10.1103/PhysRevB.101.075113.

Wu W., Scheurer M.S., Ferrero M. et Georges A., « Effect of Van Hove singularities in the onset of pseudogap states in Mott insulators », *Physical Review Research*, vol. 2, no 3, 2020, art. 033067, https://doi.org/10.1103/PhysRevResearch.2.033067.