## Spécialité de M2 : Concepts Fondamentaux de la Physique Ecole Doctorale de Physique de la Région Parisienne (ED107)

## PROPOSITION DE SUJET DE STAGE DE M2 ET/OU DE THESE

Nom Laboratoire : CPHT Ecole Polytechnique Code d'identification CNRS : UMR 7644

Nom du ou des responsables du stage ou thèse : Silke Biermann

e-mail : biermann@cpht.polytechnique.fr téléphone : 01 69 33 34 77 page web: www.cpht.polytechnique.fr/cpht/correl/people/biermann/homepage.htm

Lieu du stage: CPHT Ecole Polytechnique

Stage uniquement: NON Thèse uniquement: NON

Stage pouvant déboucher sur une thèse : OUI

## Structure électronique des matériaux corrélés

La physique moderne est capable de fournir une description théorique des propriétés électroniques de solides tels que l'aluminium ou le cuivre à partir des lois microscopiques qui gouvernent le comportement des électrons. Dans ces matériaux les interactions de Coulomb entre les électrons sont suffisamment faibles (voire bien écrantées) qu'on peut construire une théorie effective de particules indépendantes qui remplissent les niveaux d'énergie (bandes) dans le solide. Pour effectuer en pratique de tels calculs de structure de bandes des techniques performantes (telles que la fameuse théorie de la fonctionnelle de la densité qui a valu le prix Nobel à Walter Kohn en 1998) ont été développées.

Les solides dits "corrélés" sont des matériaux avec de fortes interactions de Coulomb dans lesquels les effets au-delà de la théorie des bandes deviennent cruciaux. Ce sont dans la plupart des cas des matériaux à propriétés remarquables (effets magnétiques, supraconducteurs ...) et souvent d'importance technologique. Or, nombreux sont -- dans cette classe de matériaux -- les solides pour lesquels les méthodes existantes de calculs de structures électroniques donnent des prédictions même qualitativement fausses. Certains composées de titane par exemple sont prédits d'être des métaux par la théorie des bandes tandis qu'en réalité il s'agit d'isolants.

Ce stage/cette thèse traitera de la structure électronique de matériaux corrélés au-delà de la théorie des bandes, en incorporant des effets dus aux interactions fortes à l'aide de techniques de la théorie des champs (notamment de la théorie du champ moyen dynamique). Selon les intérêts de l'étudiant l'accent peut être mis plus sur l'étude de certains matériaux spécifiques, sur certains phénomènes généraux ou sur le développement des méthodes.

Ce travail permettra à l'étudiant de se familiariser avec les techniques de calculs de structures de bandes, mais aussi avec la théorie des effets dits à N corps. En plus, l'étudiant pourra acquérir des connaissances de méthodes numériques modernes (Monte Carlo Quantique) et de calcul parallèle en utilisant les supercalculateurs du centre de calcul IDRIS.

Le stage/la thèse sera dirigé(e) par Silke Biermann, dans le cadre du groupe de théorie de la matière condensée au Centre de Physique Théorique de l'Ecole Polytechnique. L'étudiant bénéficiera aussi de contacts fréquents avec d'autres équipes travaillant sur des thèmes voisins sur le plateau d'Orsay-Saclay-Palaiseau (B. Amadon au CEA Bruyères-le-Châtel, O. Parcollet au CEA Saclay, M. Rozenberg au LPS Orsay, et L. Reining au LSI-Polytechnique). En outre, ce groupe a des liens forts avec le LPS Orsay ou plusieurs groupes expérimentaux mènent des études sur les matériaux corrélés en utilisant des techniques diverses. Les contacts internationaux de l'équipe incluent notamment des chercheurs en Allemagne, au Japon et aux États-Unis.

Indiquez le ou les parcours (ex DEA) qui vous semblent les plus adaptés au sujet :

Physique de la matière condensée : OUI Physique des Liquides OUI (?)
Physique Quantique: OUI Physique Théorique OUI