



Cérémonie de réception des nouveaux membres – Le 23 juin 2015

Matériaux, phénomènes collectifs et corrélations électroniques

Antoine GEORGES, *membre de l'Académie des sciences*

Il y a un peu moins de 25 ans, jeune post-doctorant à l'Université de Princeton, je passais semaine après semaine de longues heures enfermé dans un bureau avec mon complice Gabriel Kotliar, de l'Université voisine de Rutgers. Nous tentions d'établir des équations décrivant le comportement d'électrons interagissant entre eux lorsqu'ils sont placés dans un espace de dimension infinie¹ - un problème qui au premier abord peut paraître plutôt éloigné de la réalité concrète.

La méthode que nous allions finalement mettre au point, publiée en 1992 avec d'ailleurs de grandes difficultés, est aujourd'hui connue sous le nom de *théorie de champ moyen dynamique*. Je pense que c'est en grande partie à ce travail que je dois le plaisir et l'honneur d'être accueilli parmi vous aujourd'hui, mes chères consœurs et chers confrères. Vingt-cinq ans plus tard, et après bien des développements et des généralisations, cette méthode est utilisée par de nombreuses équipes pour calculer les propriétés de matériaux bien réels, aussi diverses que la transition métal-isolant d'oxydes de vanadium ou de nickel, la couleur rouge de pigments à base de sulfure de cérium, les transitions structurales du plutonium, ou encore certaines propriétés des oxydes de cuivre supraconducteurs « à haute température critique ».

Plutôt que de vous infliger un exposé trop technique, je voudrais raconter ici quelques étapes du voyage qui m'a conduit à ces travaux.

Je suis un physicien théoricien. Mon premier amour en physique a été la découverte du *Lagrangien* faite en suivant l'enseignement d'un professeur de classes préparatoires exceptionnel et en ouvrant les premières pages du premier tome du fameux cours de Landau et Lifchitz. Un peu plus tard, j'ai été nourri à la mamelle de la théorie quantique des champs, et de ses applications à la physique des particules comme à la physique statistique. Cette formation, je la dois à des maîtres dont plusieurs sont présents ici aujourd'hui et qui se reconnaîtront, j'en suis certain. Elle a constitué un socle théorique indispensable à mes futurs travaux en physique de la matière condensée.

Mais d'autres rencontres m'ont aussi influencé. J'ai fait ma thèse au laboratoire de physique théorique de l'École Normale, dans une atmosphère de liberté à la fois extraordinaire et un peu effrayante, en compagnie de deux comparses, Pierre Le Doussal et Jean-Philippe Bouchaud, qui me fascinaient par leurs talents si différents et si complémentaires. Ensemble, nous nous sommes aventurés du côté des phénomènes de diffusion non-Brownienne dans les milieux désordonnés. Je prends goût alors à une physique utilisant des arguments plus qualitatifs, à une vision plus probabiliste de la physique statistique.

¹ Inspirés en cela par les travaux de Walter Metzner et Dieter Vollhardt, qui avaient montré en 1989 tout l'intérêt de l'étude des modèles d'électrons corrélés en grande dimension.



Cependant, nous sommes au milieu des années 1980, et le sentiment d'être né un peu trop tard m'envahit souvent : du côté de la physique des particules, les bosons W et Z ont été découverts depuis déjà quelques années et le modèle standard triomphe ; du côté de la physique statistique des contributions déterminantes au problème si fécond des verres de spin viennent d'être faites.

Heureusement, il y a de grands bouleversements qui viennent d'un coup réveiller l'appétit d'un jeune scientifique affamé. En 1984, la théorie des cordes apparaît –ou plutôt réapparaît - sur le devant de la scène. En 1986, dans un tout autre registre, Bednorz et Müller découvrent une nouvelle famille d'oxydes de cuivre qui sont des supraconducteurs – c'est à dire qu'ils transportent un courant sans aucune perte par dissipation- à des températures bien au-dessus de celle de l'azote liquide – un espoir jamais réalisé jusqu'alors. Il n'est plus question de naviguer entre différents domaines : pour entrer dans la course, un choix s'impose.

Pour moi, ce choix est évident : je ne suis pas assez bon en maths pour exceller dans les nouveaux développements qui s'annoncent du côté des cordes. Et puis, même si je suis un théoricien, j'aime le contact avec l'observation et les expériences, et j'aime la physique qui reste une science de la nature. Des nouveaux faits expérimentaux mystérieux, les cuprates supraconducteurs en révèlent alors chaque semaine. Une fois ma thèse passée – un étrange mélange de physique des particules, de théorie des champs et de physique statistique – je décide de partir aux États-Unis pour y travailler dans le domaine de la physique quantique des solides.

Je m'étais en fait déjà intéressé à ce domaine, stimulé –toujours – par la lecture de Landau et Lifchitz (mais cette fois des tome 8 et 9), et aussi entre autres par un grandiose problème d'écrit du concours de l'École Normale portant sur l'Hélium liquide et dont je soupçonne l'un d'entre vous ici d'être l'un des auteurs. J'avais aussi un compte à régler avec la chimie, qui m'avait valu d'être collé à ce concours malgré une brillante note à cet écrit de physique : réapprendre où se trouvait le cuivre et l'oxygène dans la classification périodique n'était donc pas pour me déplaire.

Dans de nombreux matériaux, on peut considérer que les électrons se comportent de manière assez indépendante les uns des autres. Dans ces oxydes de cuivre, en revanche, ils sont très interdépendants. Cette situation n'est pas rare : elle se présente dans toute une famille de matériaux, appelés pour cette raison *matériaux à fortes corrélations électroniques*. Nombre de ces matériaux font partie de notre environnement quotidien, les oxydes de métaux de transition par exemple - depuis la rouille jusqu'aux batteries de nos téléphones portables.



Ces *corrélations électroniques* se manifestent par des phénomènes originaux et parfois spectaculaires, comme le magnétisme, la supraconductivité ou encore des transitions métal-isolant. Ces propriétés ont toutes en commun que les électrons « jouent collectif », en raison de leurs interactions. Elles sont autant de fonctionnalités prometteuses pour les applications, et les oxydes complexes sont de sérieux candidats pour prendre leur part dans le développement futur de l'électronique. L'un des grands enjeux actuels est d'en contrôler et d'en combiner les propriétés, en particulier grâce aux techniques d'élaboration à l'échelle du plan atomique unique et de nano-structuration.

Face à ces corrélations électroniques, le théoricien se trouve confronté à une difficulté redoutable. Comment traiter ces interdépendances entre électrons et les phénomènes collectifs qui en résultent, sans devoir prendre en compte tous les constituants du système en détail, en nombre colossal ? Dans les matériaux où les corrélations sont faibles, on peut le faire en adaptant l'idée du champ moléculaire – ou champ moyen – introduite en 1907 par Pierre Weiss pour le ferromagnétisme. On imaginera que l'ensemble des autres électrons agit sur un électron donné comme un environnement moyen, un peu comme lorsqu'on décrit l'interaction d'un individu avec le milieu dont il fait partie sans entrer dans le détail des interactions d'individu à individu.

Pour les matériaux ayant de fortes corrélations électroniques, ces approches sont cependant mises en échec. Pour surmonter cette difficulté, l'idée clé de la théorie de champ moyen dynamique est de remettre les atomes eux-mêmes au centre de l'attention. Dans cette approche, l'entité de base est une couche atomique qui échange des électrons avec un milieu effectif. Cet échange d'électrons se fait d'une manière qui dépend de l'énergie, ou si vous préférez de l'échelle de temps considérée. Ainsi, aux temps courts (ou à haute énergie), la théorie permet-elle de décrire les électrons localisés sur leurs atomes. Aux temps longs (ou aux basses énergies), la théorie permet de décrire l'apparition d'excitations délocalisées permettant la conduction électronique.

Les chimistes présents ici ne seront pas surpris d'entendre qu'un matériau est avant tout une assemblée d'atomes ! Pourtant, en ouvrant la plupart des livres de physique des solides, vous constaterez que la grande majorité des pages est consacrée à décrire un solide comme un gaz d'électrons, et que les atomes sont bien vite oubliés. En remettant les atomes au cœur de la description d'un solide, la théorie de champ moyen dynamique permet de renouer le lien avec la chimie du solide, pour qui recouvrement d'orbitales atomiques, environnement local, champ cristallin, sont les concepts fondamentaux qui lient structure et propriétés.

Encore faut-il pour cela que le physicien n'en reste pas aux modèles idéalisés et simplifiés à l'extrême. Il a donc fallu marier la théorie de champ moyen dynamique et les calculs de structure électroniques des matériaux, une entreprise interdisciplinaire qui se poursuit encore aujourd'hui, et qui a considérablement augmenté notre capacité à comprendre les propriétés des matériaux à fortes corrélations.



Dans cette entreprise, le développement de méthodes numériques a joué un rôle essentiel. Même si ses bases conceptuelles sont celles de la physique statistique et de la théorie quantique du problème à N corps, la théorie de champ moyen dynamique se situe donc aussi dans le cadre du développement de la physique numérique, qui constitue à mon avis un grand tournant de la physique de la seconde moitié du vingtième siècle. En physique, comme dans bien d'autres domaines, l'ordinateur donne accès à une nouvelle manière de faire de la science, qui entretient avec la théorie et l'expérimentation un dialogue fructueux. Il est très regrettable que la « science faite avec le numérique » soit encore si peu enseignée en France, dès les classes du secondaire et surtout en classes préparatoires et dans les grandes écoles. Il faut aussi soutenir l'élaboration de bibliothèques et de codes librement accessibles, qui est souvent une entreprise de longue haleine.

Cette rapide description de mon itinéraire en physique aura montré j'espère que le métissage de différentes cultures scientifiques est porteur de développements nouveaux. J'ai pu ainsi voyager des cités bien ordonnées de la théorie des champs et de la physique statistique jusqu'à la jungle complexe et fascinante des matériaux, à bord d'embarcations diverses – méthodes analytiques ou algorithmes numériques.

Actuellement, notre équipe de recherche s'efforce de tenir ensemble ces différents axes de développement : nouvelles méthodes théoriques, nouveaux algorithmes, utilisation de ces outils pour comprendre des modèles simples aussi bien que des matériaux réels. Il s'agit bien d'un travail d'équipe : il est pratiquement impossible à un seul individu de maîtriser tous ces aspects, et je suis fier que sur n'importe lequel d'entre eux il y ait toujours dans l'équipe un collègue plus jeune qui soit bien plus en pointe que moi-même.

A toutes celles et à tous ceux qui ont accompagné ce voyage et l'ont rendu possible, compagnons au long cours ou de l'une des escales, et particulièrement à ceux et celles qui sont présents ici aujourd'hui, je voudrais témoigner ma profonde reconnaissance.

Je voudrais aussi leur dire que j'espère qu'ils vont casser la vieille embarcation, et inventer des méthodes radicalement nouvelles qui vont faire oublier celle dont j'ai parlé aujourd'hui !

Un tel voyage prend du temps et ne peut s'entreprendre sans la confiance des armateurs. À l'époque, et encore aujourd'hui, la mode dans mon domaine était plus à l'esquisse rapide de scénarios qu'au développement de méthodes. Jamais nous n'aurions développé la théorie du champ moyen dynamique si nous n'avions pas eu la sécurité de postes permanent – une époque bien révolue où l'on pouvait partir en post-doc en ayant déjà obtenu un poste au CNRS !



Jamais non plus nous n'aurions développé cette méthode si nous avions écouté la longue litanie de ceux proclamant que notre point de départ était trop loin des réalités concrètes – tant il est vrai que le processus qui transforme un progrès fondamental en outil pratique ne se prévoit pas.

Enfin et surtout, un tel voyage ne s'entreprend pas sans le soutien et l'amour de ses proches, que je remercie ici du fond du cœur.