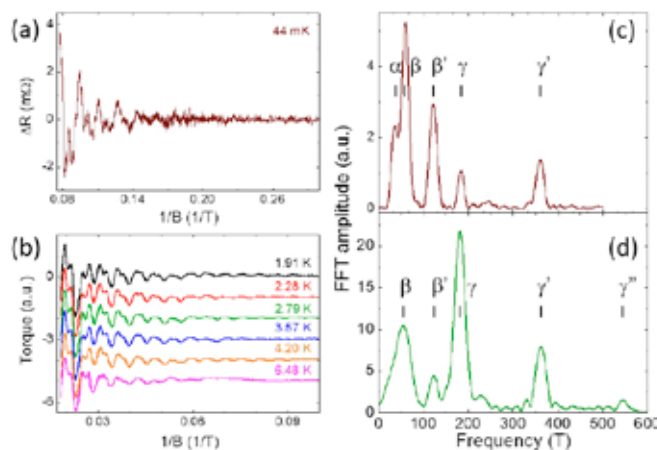


## L'expérience et la théorie s'accordent pour décrire la structure électronique du semimétal BaNiS<sub>2</sub>

*Les propriétés physiques de basse énergie d'un métal sont déterminées par les états électroniques formant sa surface de Fermi. Il en est de même pour un semimétal avec comme particularité une surface de Fermi minuscule. Les semimétaux des éléments de transition revêtent une extrême importance en science des matériaux. D'une part en raison de leurs propriétés remarquables d'intérêt technologique : la grande mobilité des porteurs de charges pourrait permettre des applications dans le domaine de l'électronique. D'autre part, ils représentent un défi du point de vue théorique car leur surface de Fermi très réduite exacerbe l'impact des effets de corrélations électroniques. Après la mise en évidence des effets relativistes dans le semimétal BaNiS<sub>2</sub>, les équipes Design et étude de nouveaux matériaux à propriétés remarquables (DEMARE) et Théorie quantique des matériaux (TQM) de l'IMPMC<sup>1</sup> ont décrit avec grande précision ses propriétés électroniques et révèlent ainsi de nouveaux ingrédients pour une meilleure compréhension de cette classe de matériaux.*

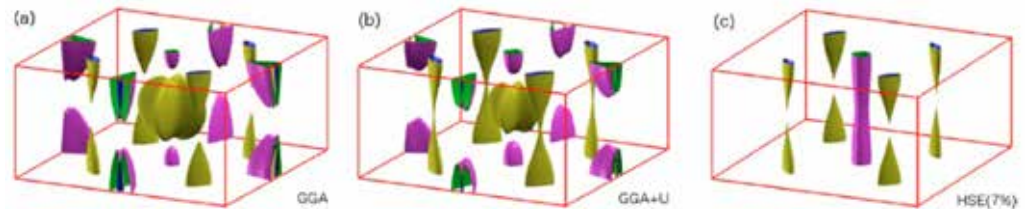
Cette réussite est due à une double prouesse, expérimentale et théorique. Des monocristaux de qualité exceptionnelle ont été synthétisés et qui, plongés à basse température et sous champ magnétique intense, montrent des états électroniques quantifiés en fonction du champ magnétique (Fig. 1), utilisé comme sonde de la surface de Fermi. Les résultats montrent une surface de Fermi bidimensionnelle contredisant toutes les théories précédentes qui prédisent un caractère tridimensionnel.



**Figure 1**

(a) Partie oscillatoire de la résistance électrique,  $\Delta R$  mesurée à  $T = 44$  mK. Partie oscillatoire du couple magnétique,  $\Delta\tau$  mesuré à différentes températures. (c) et (d) montrent les transformées de Fourier de  $\Delta R$  et  $\Delta\tau$  ( $T = 2.28$  K).

En collaboration avec l'équipe TQM, ce désaccord a été expliqué par la prise en compte de plusieurs effets – ignorés jusqu'à présent – dans les calculs *ab initio*. Les effets considérés sont de trois types : (i) le couplage spin-orbite anormalement élevé dans  $\text{BaNiS}_2$  (Fig. 2a), (ii) les corrélations électroniques locales qui, même en étant modérées, ne peuvent être négligées pour un semimétal (Fig. 2b) et (iii) l'écrantage de l'interaction d'échange (Fig. 2c). C'est ce dernier effet, implémentée pour la première fois dans le calcul de la surface de Fermi de  $\text{BaNiS}_2$ , qui constitue la clé de la réussite de ce travail. Sous cette condition forte, la surface de Fermi calculée est de nature bidimensionnelle et reproduisant ainsi fidèlement les résultats expérimentaux.



**Figure 2**

*Surfaces de Fermi de  $\text{BaNiS}_2$ , obtenues par calcul *ab initio* avec prise en compte du couplage spin-orbite (a), plus des corrélations électroniques locales (b), plus de l'écrantage de l'interaction d'échange (c).*

En conclusion, la qualité exceptionnelle des échantillons synthétisés et la technique expérimentale avancée ont permis une description précise des propriétés électroniques du semimétal  $\text{BaNiS}_2$ . Des calculs *ab initio* incluant la dose adéquate de l'interaction d'échange reproduisent ces propriétés. Appliquer cette méthode à d'autres membres de la vaste famille des semimétaux devrait mener à des prédictions plus réalistes de leurs propriétés.

### Références

"Importance of nonlocal electron correlation in the  $\text{BaNiS}_2$  semimetal from quantum oscillations studies"

Yannick Klein, Michele Casula, David Santos-Cottin, Alain Audouard, David Vignolles, Gwendal Fève, Vincent Freulon, Bernard Plaçais, Marine Verseils, Hancheng Yang, Lorenzo Paulatto, and Andrea Gauzzi

*Physical Review B* (2018), vol 97, p 075140

### Contact

Yannick Klein : [yannick.klein@sorbonne-universite.fr](mailto:yannick.klein@sorbonne-universite.fr)