

UNIVERSITÉ PARIS-SUD

ÉCOLE DOCTORALE PHYSIQUE EN ÎLE DE FRANCE
LABORATOIRE DE PHYSIQUE DES SOLIDES

DISCIPLINE : PHYSIQUE

THÈSE DE DOCTORAT

Soutenue le 09/02/2015 par

Gabriel Lantz

Résumé en Français :
Dynamique ultrarapide des électrons
dans
les matériaux de Mott

Directeur de thèse : Marino Marsi
Co-directeur de thèse : Davide Boschetto

Composition du jury :

Président du jury : Marc Gabay
Rapporteurs : Michael Bauer
Eric Beaurepaire
Examineurs : Laurent Cario
Marcelo Rozenberg
Daniele Fausti

Table des matières

1	Introduction	2
1.1	Introduction	2
1.2	La transition de Mott	3
1.2.1	V_2O_3 : un prototype de Mott-Hubbard	4
1.2.2	$BaCo_{1-x}Ni_xS_2$: un isolant de Mott à liaisons ioniques modérées	5
1.3	Expériences ultrarapides	7
1.3.1	Processus de relaxation	7
1.3.2	Modèle à deux températures.	8
1.4	Techniques expérimentales	8
2	Résultats expérimentaux	10
2.1	Etude de V_2O_3 à l'aide de la réflectivité résolue en temps	10
2.2	Etude de V_2O_3 à l'aide de la spectroscopie THz résolue en temps	11
2.3	ARPES résolue en temps pour l'étude de V_2O_3	12
2.4	ARPES résolue en temps pour l'étude de $BaCo_{1-x}Ni_xS_2$	14
3	Conclusions	17
	Bibliographie	19

Introduction

1.1 Introduction

Les matériaux corrélés sont des systèmes où l'on doit considérer l'interaction entre les différentes particules pour comprendre ses propriétés macroscopiques. Ces interactions engendrent des phases complexes comme des phases supraconductrices, des ondes à densité de charge, des transitions métal-isolant. La plus connue de ces interactions est la répulsion Coulombienne, qui en l'augmentant peut déclencher une transition métal-isolant. Si cette transition ne présente pas brisure de symétrie, elle est appelée transition de Mott. Le passage de cette transition peut être contrôlé par les constantes thermodynamiques standards comme la température, la pression, ou la substitution chimique. De nouvelles pistes de contrôle ont été explorées récemment utilisant des pulses électriques ou des pulses laser. Ils présentent l'opportunité de passer d'un isolant à un métal de manière très rapide, donc d'être utilisés pour des applications technologiques. Un autre avantage des impulsions femtosecondes laser est qu'elles permettent de visualiser le moment où les électrons et le réseau ne sont pas à l'équilibre. L'impulsion laser excite initialement seulement les électrons qui se couplent au réseau après quelques centaines de femtosecondes. La visualisation de cette relaxation permet d'avoir accès au couplage électron-phonon qui est une valeur assez dure à obtenir avec des techniques proches de l'équilibre.

Dans cette thèse, je propose d'étudier, en utilisant des techniques ultrarapides, un prototype d'un isolant de Mott-Hubbard, $(V_{1-x}Cr_x)_2O_3$, ainsi qu'un autre isolant de Mott $BaCo_{1-x}Ni_xS_2$. Dans la première partie j'introduirai la transition de Mott et les deux matériaux étudiés. La deuxième partie sera dédiée aux résultats expérimentaux obtenus à l'aide des techniques de réflectivité résolue en temps, spectroscopie THz résolue en temps, et ARPES résolue en temps. La conclusion présentera une vision cohérente de tous les résultats expérimentaux.

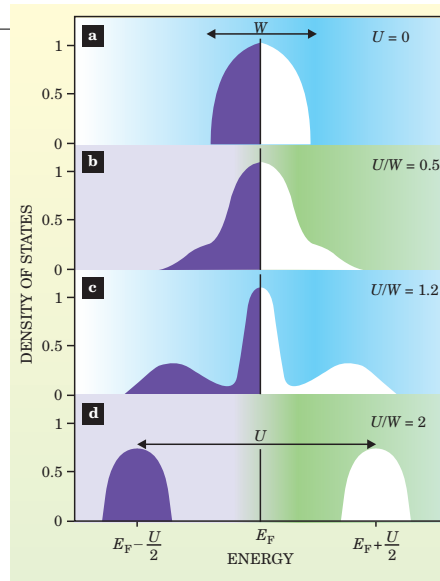


Fig. 1.1 – Densité d’états pour différentes valeurs de U/W dans le cas d’un modèle de Hubbard à demi remplissage (de [13])

1.2 La transition de Mott

En 1937, De Boer et Verwey soulignèrent que les oxydes de métaux de transition avec orbitales 3d et 4d partiellement remplies avaient une très faible conductivité électronique et ils ont suggéré que le modèle de l’électron libre ne pouvait pas expliquer leurs propriétés [4]. Ces observations conduisirent N.F. Mott à introduire une interaction électrostatique entre les électrons afin de comprendre ces composés [20, 19]. La répulsion de Coulomb introduit a pu expliquer l’écart entre les expériences et les prédictions du modèle de l’électron libre. Dans un isolant de Mott, la majorité des électrons sont localisés à proximité des atomes et les électrons, qui se déplacent, trouvent les atomes occupés par conséquent la conductivité est significativement abaissée. Cela peut être considéré comme une compétition entre l’énergie cinétique des électrons et la répulsion Coulombienne. Si la répulsion Coulombienne est plus élevée, le matériau devient isolant. Fig.1.1 montre la densité d’états pour différents ratio entre la répulsion de Coulomb, U , et la largeur de bande, W : résultant en une bande inférieure complètement remplie et une bande supérieure entièrement vide appelée bande inférieure et supérieure de Hubbard.

Le modèle théorique le plus couramment utilisé est le modèle de Hubbard [11]. Le hamiltonien se compose de deux termes, le premier est l’énergie cinétique définie par le hopping t et le second est la répulsion de Coulomb U . Ce modèle a été résolu pour le cas du demi remplissage à l’aide de la théorie de champ dynamique moyen (DMFT) [8, 9, 13]. Un des matériaux prototypes pour la transition de Mott est

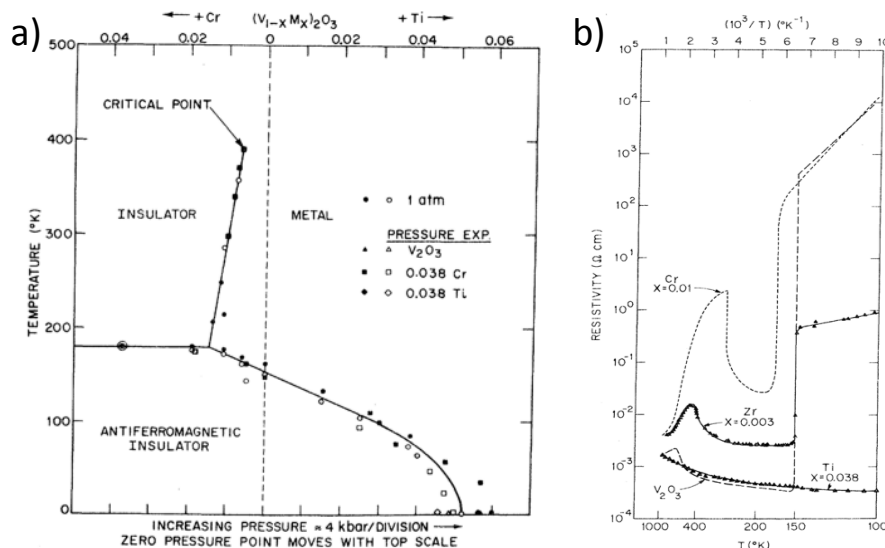


Fig. 1.2 – a) Diagramme de phase de V_2O_3 , b) mesures de résistivité (de [15])

$(V_{1-x}Cr_x)_2O_3$, présenté ci-après.

1.2.1 V_2O_3 : un prototype de Mott-Hubbard

En 1969, MCWhan et al. ont réussi à croître des monocristaux de hautes qualité de $(V_{1-x}Cr_x)_2O_3$ et ont effectué des mesures de résistivité et de diffraction X. Ils ont observé une transition du premier ordre à 180 K pour le composé pur accompagné d'un changement de phase structurale. Une seconde transition de premier ordre a également été observée à 300 K pour le composé dopé 1% Cr mais cette fois avec aucune brisure de symétrie [16]. Fig.1.2 montre le diagramme de phase. Le diagramme de phase est constitué de trois phases, un métal paramagnétique (PM), un isolant paramagnétique (PI), et un isolant antiferromagnétique (AFI). La transition de Mott est la transition entre PM et PI. De nombreuses approches théoriques ont été utilisées pour comprendre la structure électronique de V_2O_3 . Les atomes de vanadium sont triplement oxydés donc chaque vanadium apporte deux électrons à liaison V-V. Le champ cristallin octaédriques séparent les orbitales d en une bande inférieure t_{2g} et une bande supérieure e_g^σ . Les octaèdres ont une distorsion trigonale donc les t_{2g} sont divisées en un plus faible état doublement dégénéré e_g^π et un état seul liant a_{1g} . L'hybridation entre les deux atomes de vanadium (V_1-V_4) conduit à une forte liaison a_{1g} . Le consensus actuel est que la bande e_g^π est inférieure à l'état liant a_{1g} . La transition de Mott dépend de l'occupation de l'orbital a_{1g} , vide dans la phase PI et un peu plus remplie dans la phase PM [10, 12]. La structure électronique est représentée dans la Fig.1.3. Afin de comprendre le comportement universelle des isolants de Mott loin de l'équilibre, un

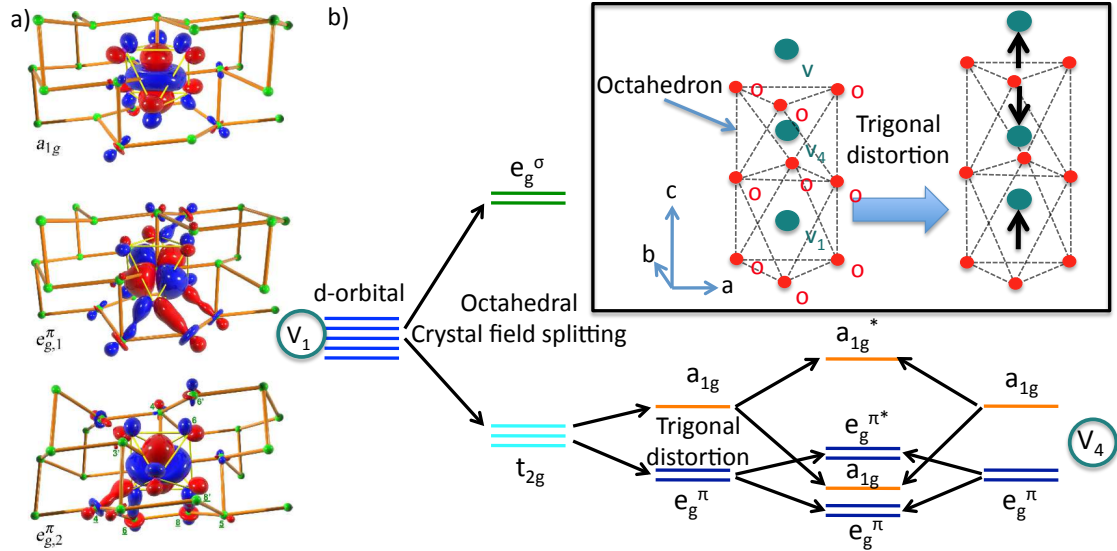


Fig. 1.3 – a) Représentations des orbitales a_{1g} et e_g^π (de [23]), b) Structure électronique de V_2O_3

autre isolant de Mott, $BaCo_{1-x}Ni_xS_2$, a été étudié.

1.2.2 $BaCo_{1-x}Ni_xS_2$: un isolant de Mott à liaisons ioniques modérées

Le système $BaCo_{1-x}Ni_xS_2$ est un exemple intéressant d'une transition Métal-Isolant (TMI) contrôlée par dopage. Son diagramme de phases est similaire à celle des cuprates (voir Fig.1.4), mais aucune supraconductivité n'a été trouvée. A faible dopage, le système est un isolant paramagnétique qui ordonne antiferromagnétiquement à environ 305 K. La TMI est traversée pour un dopage de $x=0,16$ à 300 K [24, 26]. Le système est isostructural dans l'ensemble du diagramme de phase. Aucune brisure de symétrie n'est observée à la TMI, ce qui implique une transition de Mott.

Afin de mieux comprendre le composé, nous avons effectué des expériences ARPES sur les deux dopages extrêmes pour $x=0$ et $x=1$. Les résultats présentés ci-après sont les premières expériences ARPES haute résolution effectuées sur ces composés. Fig.1.5 représente les données ARPES pour les deux composés. Pour le métal, 3 bandes croisent le niveau de Fermi dont 2 près de Γ . Dans le composé isolant les 3 bandes sont aussi présentes mais elles sont plus large et ont une énergie plus faible, ce qui est caractéristique de l'effet des corrélations [3].

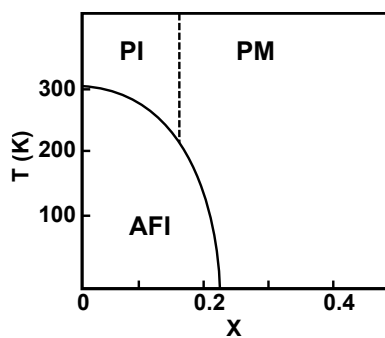


Fig. 1.4 – Diagramme de phase $\text{BaCo}_{1-x}\text{Ni}_x\text{S}_2$.

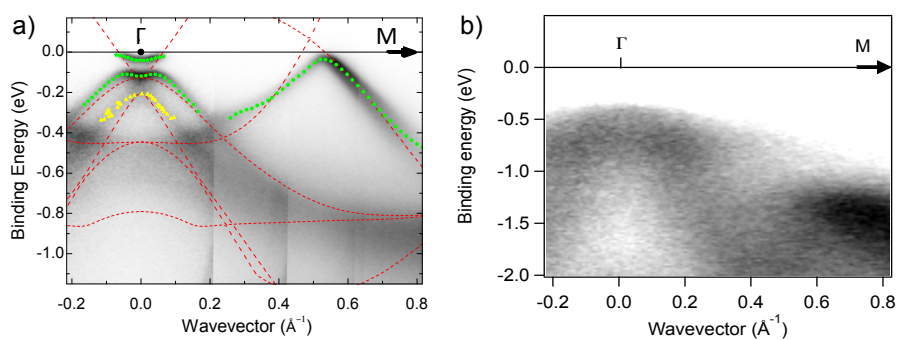


Fig. 1.5 – Dispersion de bande proche de Γ dans a) BaNiS_2 et b) BaCoS_2

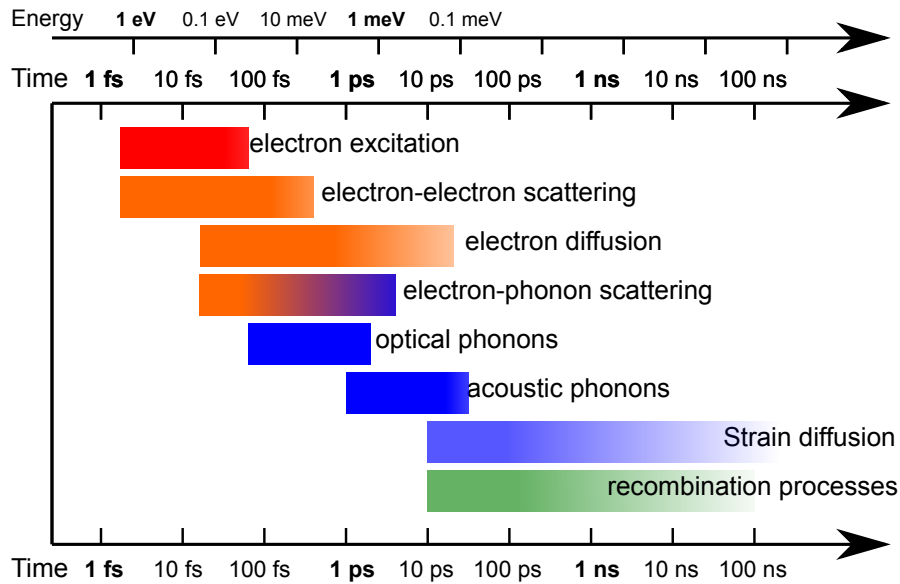


Fig. 1.6 – Temps caractéristique pour les processus de relaxations

1.3 Expériences ultrarapides

La physique des phénomènes ultrarapides a deux objectifs principaux : le premier est de mieux comprendre l'état de la matière ainsi que ses états excités, et le deuxième est de manipuler ses propriétés physiques. L'idée principale de ce genre d'expériences ultrarapides est de sonder la réaction du matériau après une excitation optique. Le système est excité par une pompe puis il est observé avec une sonde après un retard contrôlable. Les processus de relaxation vont donner des informations utiles sur le couplage entre les différents degrés de liberté.

1.3.1 Processus de relaxation

Les processus de relaxation ont différents temps caractéristiques, qui sont représentés dans la Fig.1.6. La pompe est absorbée par les électrons en moins de 50 fs. Le phénomène le plus rapide est l'interaction entre les électrons. Puis les électrons se couplent aux phonons d'abord optique après 100 fs puis avec les phonons acoustiques après une picoseconde. Dans des temps plus longs les phonons acoustiques propagent les contraintes et la recombinaison des paires électrons trous commence après 10 ps. L'observation en fonction du temps permet de comprendre les différents couplages qui ont lieu dans le matériau.

1.3.2 Modèle à deux températures.

La structure de bande des métaux est continue près de l'énergie de Fermi donc aucune transitions optiques particulière n'est excitée. L'énergie de la pompe est donnée aux électrons qui peu après la transfert aux réseaux. En première approximation, les électrons et le réseau peuvent être considérés comme deux bains en interaction avec une constante de couplage entre eux [2]. Ce modèle est appelé le modèle à deux températures et donne accès au couplage électron-phonon[1].

Le modèle à deux température a été utilisé pour les métaux [6, 7] mais aussi pour les matériau corrélées comme les isolants de Mott [21] ou les supraconducteurs à haute température [22]. Toutefois ce modèle phénoménologique a ses limites et de nouvelles théories plus complexes apparaissent [5, 25], qui considèrent les variations d'autres paramètres comme un changement d'écrantage, de hopping, ou de remplissage.

1.4 Techniques expérimentales

Les interactions entre les électrons se produisent à la femtoseconde. Le couplage électron-phonon se produit plus rapidement que quelques picosecondes. Par conséquence les techniques expérimentales doivent être en mesure de saisir ces dynamiques rapides. Les méthodes optiques sont donc les seules à pouvoir observer ces dynamiques ultrarapides. Les expériences utilisent généralement la méthode pompe-sonde, où la pompe excite le système et la sonde détecte le système après un retard contrôlable, en faisant varier le retard entre la pompe et la sonde on peut accéder à l'évolution dans le temps de la matière après photoexcitation.

Dans cette thèse, l'excitation utilisée était de 1,5 eV. Différentes sondes ont été utilisées pour sonder soit les électrons soit la structure. La réflectivité optique sonde environ 100 nm dans le volume et sonde la fonction diélectrique du matériau, qui donne des informations sur la structure de bande ainsi que la structure cristalline. La diffraction X résolue en temps sonde seulement le réseau sur 100 nm alors que la photoémission résolue en angle (ARPES) sonde les électrons à la surface. La spectroscopie THz sonde les porteurs de charge dans tout le matériau. Ces différentes techniques sont représentées dans la Fig.1.7.

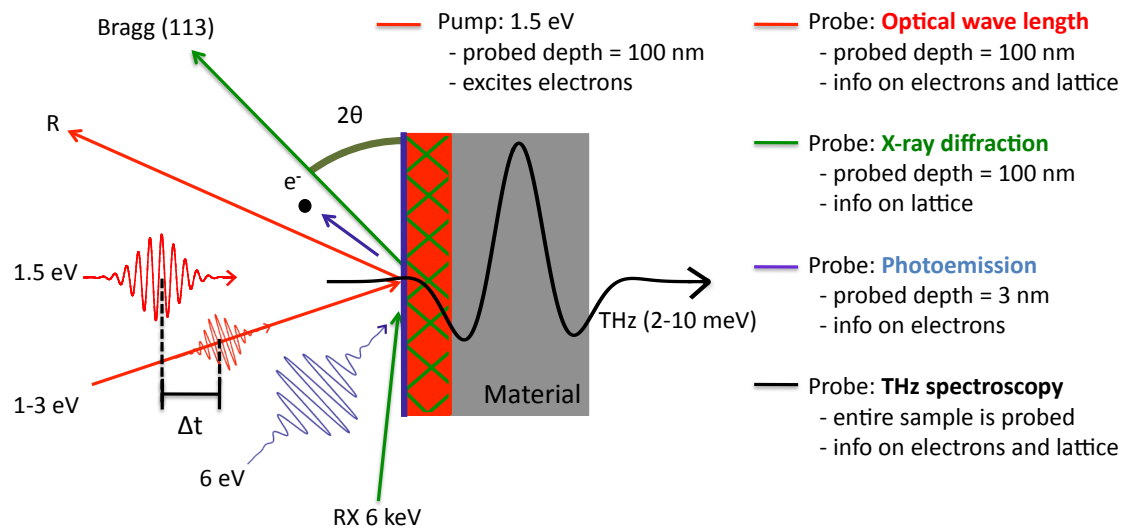


Fig. 1.7 – Schéma des différentes techniques pompe-sonde utilisées dans ce travail. La pompe a toujours une énergie de 1,5 eV. La sonde peut être : la réflectivité optique, la spectroscopie THz, la diffraction X, et la photoémission.

Résultats expérimentaux

2.1 Etude de V_2O_3 à l'aide de la réflectivité résolue en temps

B. Mansart et al. ont réalisé une étude approfondie en réflectivité résolue en temps sur V_2O_3 dans la phase PI et la phase PM. La fréquence du phonon A_{1g} selon les directions cristallographique a été extraite [14]. Le phonon A_{1g} correspond au mode de vibration symétrique, sa fréquence donne une information sur la distance V_1-V_2 qui définit la TMI. Fig.2.1 montre une trace temporelle de $\Delta R/R$. Le premier pic est une pure réponse électronique qui dure moins de 200 fs. La composante oscillatoire est le phonon A_{1g} , qui peut être extraite en soustrayant le fond non oscillatoire et en effectuant la transformée de Fourier de l'oscillation.

Toutes les directions montrent un durcissement par rapport à la fréquence Raman mais le changement le plus fort se produit lorsque le vecteur de propagation

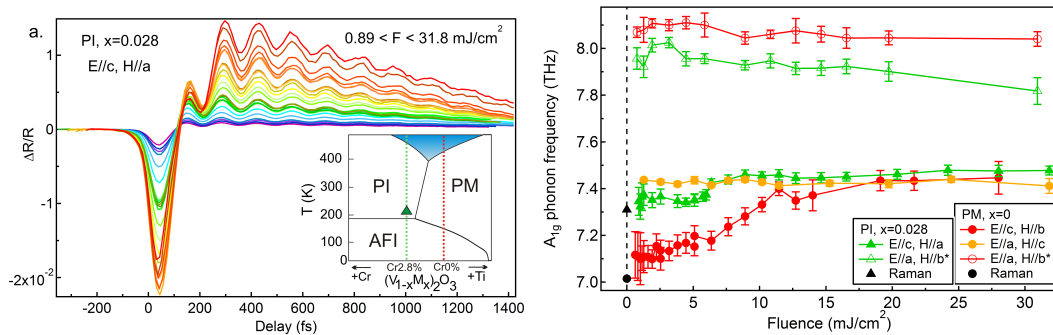


Fig. 2.1 – Réflectivité en temps résolue dans la phase PI et fréquence du phonon A_{1g} extraite (de [14])

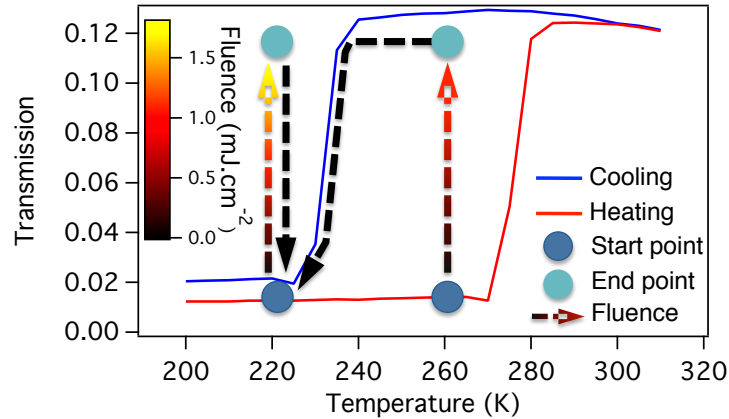


Fig. 2.2 – Transmission THz à l'équilibre dans le cycle d'hystérésis de $(V_{1-x}Cr_x)_2O_3$ ($x=0.011$). Les points bleus sont les points de départ et les points verts sont ceux d'arriver. Les couleurs des flèches représentent la fluence nécessaire.

des photons k est parallèle à l'axe c . Ce durcissement est un phénomène extrêmement rare car il s'oppose à l'effet d'une élévation de température. L'augmentation de la fréquence a été interprétée comme la population par la pompe de orbital a_{1g} depuis les orbitales e_g^π . Comme l'orbital a_{1g} est liante elle rapproche les atomes de vanadium entre eux. L'observation de ce durcissement dure 1,5 ps.

2.2 Etude de V_2O_3 à l'aide de la spectroscopie THz résolue en temps

Spectroscopie THz est une très bonne méthode pour sonder le gap d'un matériau. Fig.2.2 représente la transmission du pulse THz pendant l'hystérésis à l'équilibre pour V_2O_3 avec un dopage en Cr de 1,1%. La transition de phase est très bien visible, les fréquences THz sont bloquées à basse température car le matériau est métallique et sont transmises à haute température car le matériau est isolant. Les flèches illustrent l'effet de l'accumulation de chaleur due au laser 1 kHz. Plus le point de départ est loin de la transition haute température plus il faut de la fluence pour transiter. Le système reste dans l'état isolant après l'arrêt de la pompe si le point de départ est dans l'hystérésis sinon il revient dans l'état métallique.

Aucun signal en temps résolu n'a été vu utilisant des fluences inférieures à celles utilisées pour la transition totale. Aucun signe d'une transition de phase purement électronique n'a été observé dans la phase PM. La non observation de la transition de phase montre que la transition de phase doit être déclenchée par la structure. Toutefois un signal temps résolu a été vu dans la phase PI. Fig.2.3 présente la

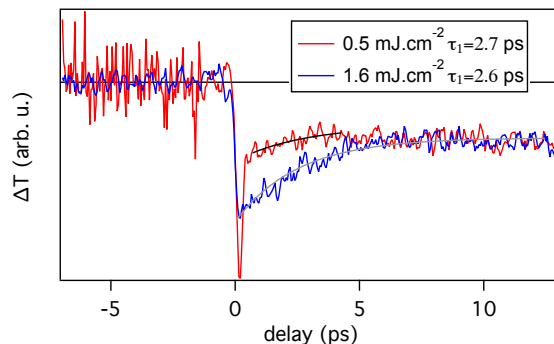


Fig. 2.3 – Evolution temporelle de la transmission THz dans $(V_{1-x}Cr_x)_2O_3$ ($x=0.011$) à 300 K (phase PI)

réponse temporelle dans la phase PI. La transmission diminue impliquant la présence de plus de porteurs de charge qui bloquent le pulse THz. Ces porteurs de charge peuvent provenir soit d'un chauffage soit d'une métallisation du matériau. Pour distinguer les deux, la réponse spectrale est observée à l'aide de l'ARPES résolue en temps.

2.3 ARPES résolue en temps pour l'étude de V_2O_3

Fig.2.4 montre la dépendance en température de l'échantillon dopée 2,8% Cr (phase PI) et l'échantillon pur (phase PM). Dans la phase PM le poids de quasi-particule (QP) augmente avec la diminution de la température. Dans la phase PI, l'augmentation de température remplit les états dans le gap : ce qui est cohérent avec les résultats de Mo et al. [17]. Les différences de spectres en température seront comparées avec les effets photoinduits.

Les différences dans la phase PI sont représentées dans Fig.2.5. La coupe verticale entre -0,2 eV et 0 eV sous le niveau de Fermi montre un premier pic qui dure moins de 200 fs. Le système atteint un premier plateau après 300 fs. La coupe horizontale à un délai de 50 fs a du poids spectral en dessous et au-dessus du niveau de Fermi, qui sont des états dans le gap. La partie supérieure du spectre est plat ce qui suppose un comportement différent d'un liquide de Fermi. Par conséquent à 50 fs le système est dans un état purement hors d'équilibre où une température électronique ne peut pas être définie. Le spectre du délai de 400 fs n'a pas de poids au niveau de Fermi ce qui confirme l'hypothèse thermalisée. Les deux spectres excités sont différents d'un spectre chauffé à l'équilibre. Par conséquent, les changements observés sont différents d'une augmentation de température simple.

Nous avons analysé la durée de vie de l'état non thermique. Fig.2.6 montre des spectres pour des délais plus longs pour le dopage 2,8% Cr. La trace temporelle

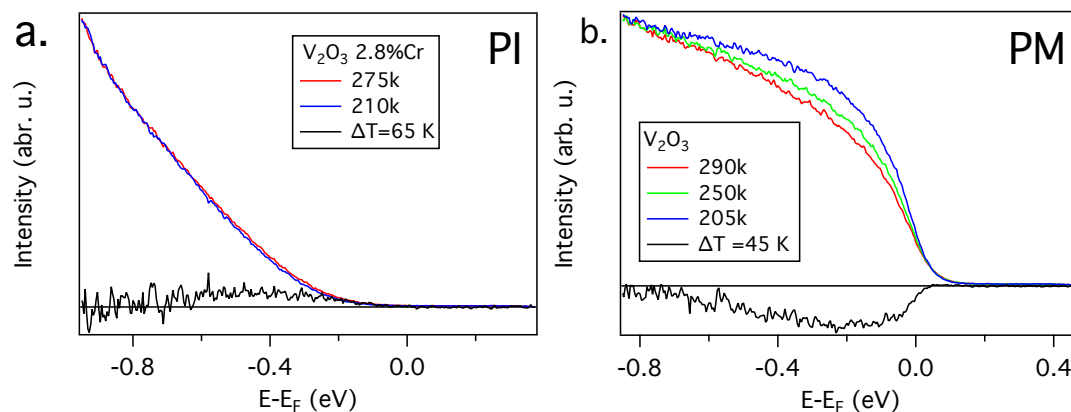


Fig. 2.4 – Spectres de photoémission pour différentes températures dans les phases PI et PM. La courbe noire est la différence entre un spectre de haute température et un de basse température.

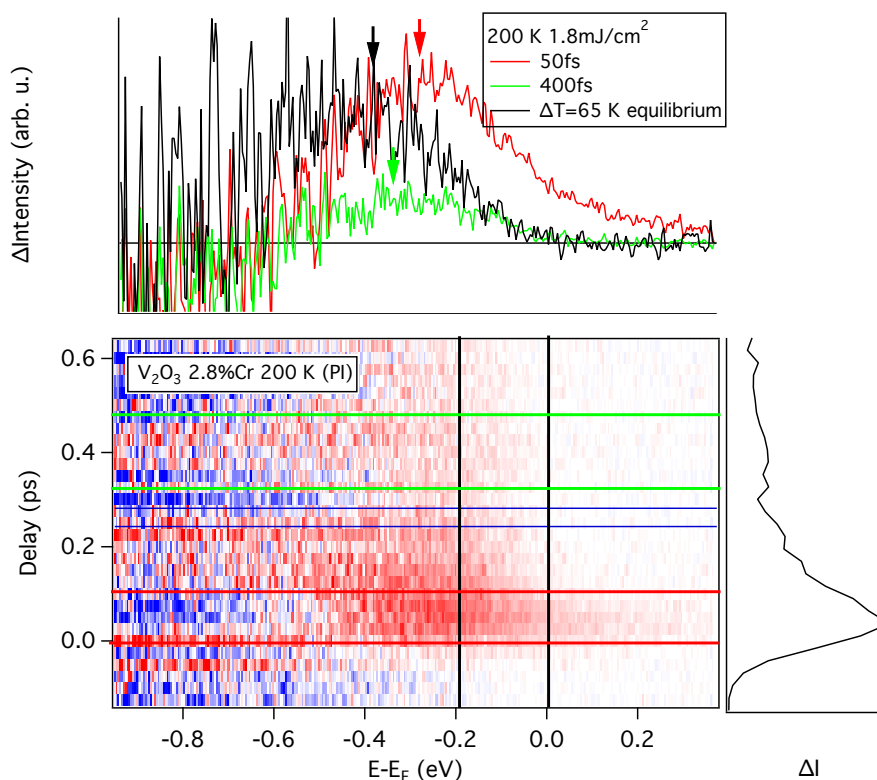


Fig. 2.5 – Spectres de photoémission à différents délai dans la phase PI. La flèche représente le centre de masse du spectre.

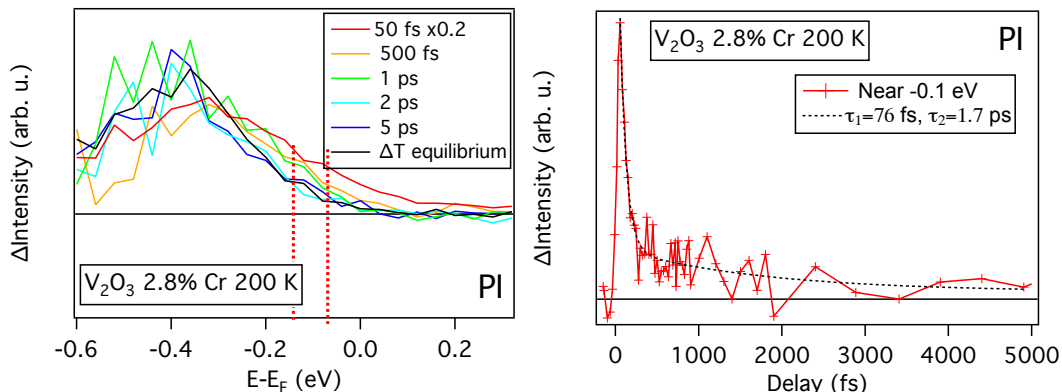


Fig. 2.6 – Spectres de photoémission pour différents délais pour 2,8% de dopage en Cr. Trace temporelle près de -0,1 eV.

près de -0,1 eV montre une relaxation qui est complètement terminée après 2 ps. Les spectres se décalent vers des énergies plus basses, qui sont plus proche d'une différence thermique à l'équilibre. Le deuxième temps de relaxation de 1,7 ps correspond au durcissement du phonon.

La même analyse peut être effectuée dans la phase PM en utilisant l'échantillon pur. Fig.2.7 montre les différences de spectres de photoémission. Deux coupes verticales peuvent être faites, au-dessus et sous le niveau de Fermi. La trace de temps au-dessus du niveau de Fermi suit les électrons excités et est très similaire à la dynamique vu dans la phase PI. La trace temporelle sous le niveau de Fermi suit le pic de QP. Le pic de QP fond de manière ultrarapide, plus vite que notre résolution temporelle. La QP est très sensible à la distance à la transition de Mott. Mo et al. ont montré que, à 200 K du spectre de l'échantillon pur a le plus haut pic de QP par rapport à un dopage en Cr ou Ti [18]. La température affecte également la QP comme vu dans Fig.2.4. Ce qui nous ne permet pas de conclure sur la nature du changement de l'intensité du pic. Le spectre de 50 fs de délai a des électrons hors équilibres. Ceux avec un délai de 400 fs ont une distribution type Fermi-Dirac.

2.4 ARPES résolue en temps pour l'étude de $\text{BaCo}_{1-x}\text{Ni}_x\text{S}_2$

Une étude ARPES résolue en temps a été réalisée sur $\text{BaCo}_{1-x}\text{Ni}_x\text{S}_2$ pour $x = 1$ et $x = 0$. Ici, il n'y a que le composé $x=0$ qui est montré. Fig.2.8 montre les mesures à l'équilibre et résolues en temps sur BaCoS_2 . L'isolant de Mott BaCoS_2 ne présente pas de dispersion importante autour du point Γ . Par conséquent, nous intégrons le spectre entre -0,1 et 0,1 eV. Les spectres avec laser et avec synchrotron sont très similaires. La différence de température indique un transfert de poids spectral de -0,4 à -0,8 eV et plus d'électrons près du niveau de Fermi. Les spectres

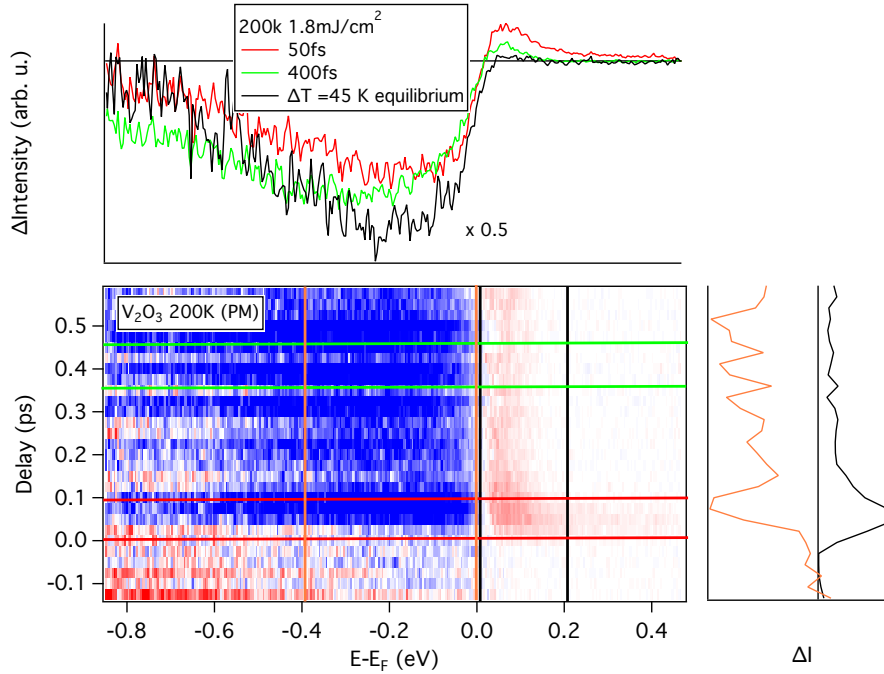


Fig. 2.7 – Différences de spectres de photoémission par rapport au délai pompe dans la phase PM.

à différents délais montrent un transfert de poids spectral de $-0,8$ eV à des énergies proches du niveau de Fermi.

Fig.2.9 montre les mesures résolues en temps sur BaCoS_2 . Le spectre à 50 fs a de nombreux électrons chauds au-dessus du niveau de Fermi qui ont disparus à 500 fs. Sous $-0,4$ eV les spectres à 50 fs et 500 fs sont très similaires. Les spectres excités sont totalement différents de la différence de température à l'équilibre. Par conséquent l'état créé par l'impulsion laser est un état nouveau hors d'équilibre qui n'est pas réalisable à l'équilibre. Les traces temporelles montrent que la dynamique ralentit plus l'énergie est faible. Les électrons qui sont sous le niveau de Fermi sont les plus lents et ont une constante de temps de 1,4 ps, très proche de l'état photoinduit de V_2O_3 .

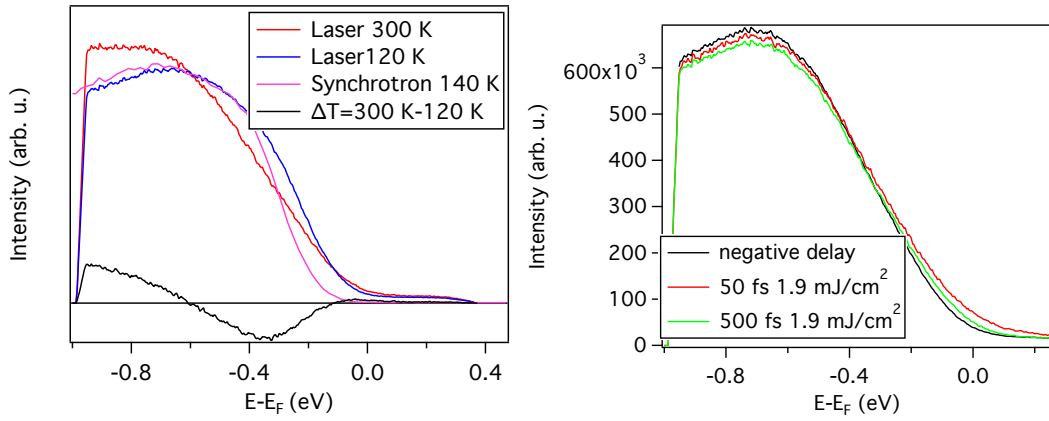


Fig. 2.8 – Spectres de photoémission près de Γ pour BaCoS_2 utilisant le laser et le rayonnement synchrotron. Spectres pour différents délais.

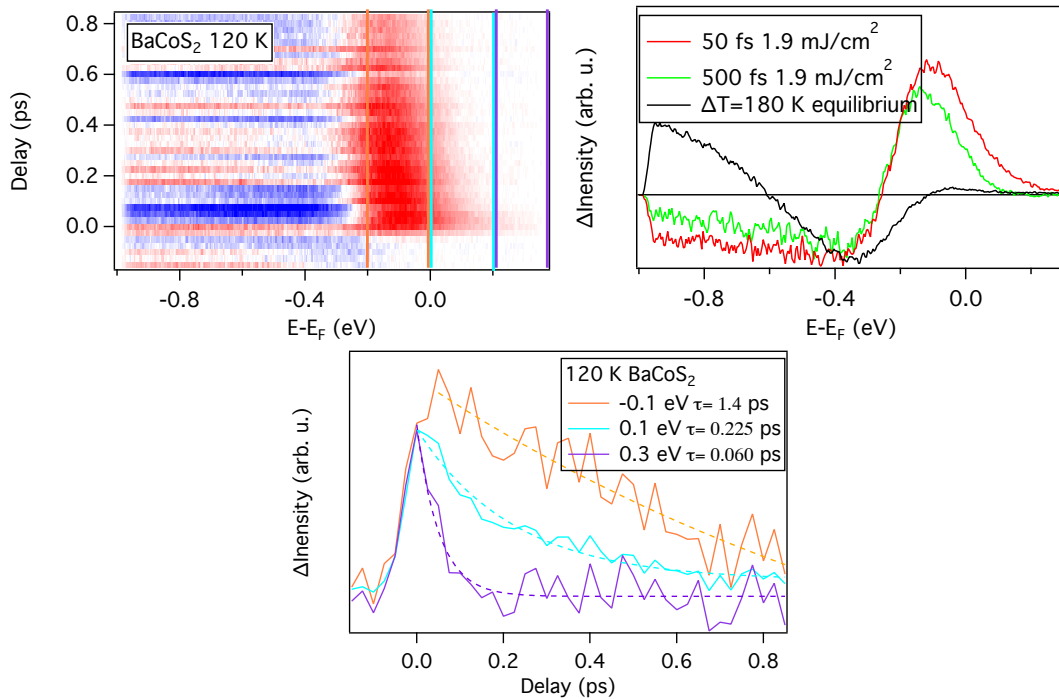


Fig. 2.9 – ARPES résolue en temps pour BaCoS_2

Conclusions

Dans cette thèse, j'ai utilisé des expériences résolues en temps ultrarapides pour étudier la réponse électronique des isolants de Mott, V_2O_3 et $BaCo_{1-x}Ni_xS_2$. L'ensemble du diagramme de phase a été exploré pour distinguer la réponse photoinduite d'un changement thermique. Avant la réponse du réseau, la photoexcitation modifie le remplissage spécifique des orbitales, en diminuant le remplissage de celles occupées et en augmentant celles inoccupées. Ce changement entraîne une fermeture du gap dans la phase PI et la disparition de la QP dans la phase PM. Les électrons chauds relaxent en moins de 200 fs à cause du fort couplage électron-phonon. Cependant un état non thermique survit pendant quelques picosecondes.

Fig.3.1 est un schéma du mécanisme proposé pour V_2O_3 . L'excitation laser vide les orbitales e_g et remplit l'orbitale a_{1g} , conduisant à un changement du remplissage spécifique des orbitales et éloigne le matériau du demi-remplissage nécessaire pour un isolant de Mott. Ensuite comme l'orbitale a_{1g} est très liante, cela conduit à un renforcement des liaisons qui se traduit par un durcissement de phonons. L'effet de ce durcissement est visible sur la structure électronique, qui a plus d'états à proximité du niveau de Fermi différent d'un état chauffé. L'état non thermique relaxe en 2 ps.

La comparaison entre $BaCo_{1-x}Ni_xS_2$ et V_2O_3 a prouvé une tendance générale des isolants de Mott : une fermeture du gap, des électrons au-dessus du niveau de Fermi qui relaxent en moins de 200 fs, et les états non-thermiques sont stables pendant quelques picosecondes. Ces propriétés sont sûrement en rapport avec les deux orbitales différentes présentes près du niveau de Fermi. La photoexcitation change le remplissage spécifique des orbitales ainsi cet état photoexcité ne peut pas être comparé à n'importe quel point sur le diagramme de phase à l'équilibre, qui est construit pour un certain remplissage des bandes.

Ce travail a grandement bénéficié des progrès technologiques dans les techniques résolues en temps. L'avènement des systèmes de laser femtoseconde stables a per-

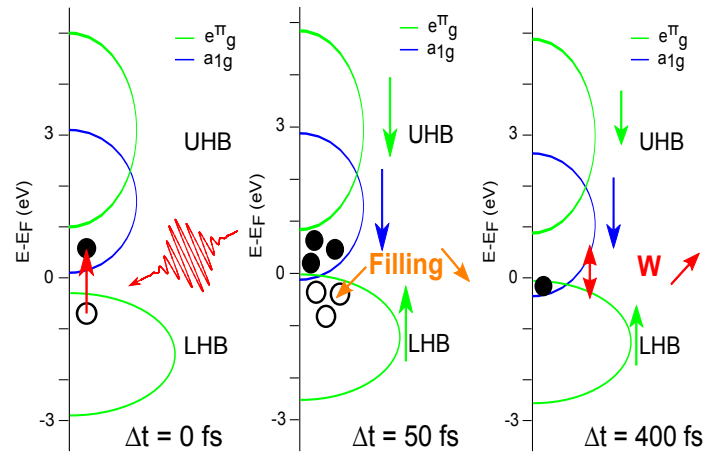


Fig. 3.1 – Schéma du mécanisme de fermeture du gap induit par photoexcitation.

mis à des mesures plus complexes d'être réalisées : tels que l'ARPES résolue en temps, la diffraction des rayons X et la spectroscopie THz. Comme le domaine des mesures résolues en temps mûrit, les techniques deviennent de plus en plus stables et de plus petits effets peuvent être analysés. La compréhension de la physique des phénomènes ultrarapides a également évolué : se détournant du modèle à deux température, en développant des modèles plus microscopiques, et le pompage cohérent de certaines transitions optiques.

Le domaine des phénomènes femtoseconde résolue en temps est assez jeune donc de nombreuses études doivent encore être effectuées. La réponse du réseau et celle de la structure électronique devraient être étudiées dans d'autres isolants de Mott afin de comprendre si la fermeture du gap est accompagné d'une distorsion du réseau.

Bibliographie

- [1] P. B. Allen. Theory of Thermal Relaxation of Electrons in Metals. *Physical review letters*, 59(13) :1460–12463, 1987.
- [2] S. Anisimov, B. Kapeliovich, and T. Perel'Man. Electron emission from metal surfaces exposed to ultrashort laser pulses. *Zh. Eksp. Teor. Fiz*, 66(2) :375–377, 1974. URL : http://www.jetp.ac.ru/cgi-bin/dn/e_039_02_0375.pdf.
- [3] A. Damascelli. Probing the Electronic Structure of Complex Systems by ARPES. *Physica Scripta*, T109 :61, 2004. URL : <http://www.physica.org/xml/article.asp?article=t109a00061.xml>, doi:10.1238/Physica.Topical.109a00061.
- [4] J. H. De Boer and J. W. Verwey. Semi-conductors with partially and with completely filled 3d-lattice bands. *Proceedings of the Physical Society*, 49 :59, 1937.
- [5] M. Eckstein, M. Kollar, and P. Werner. Thermalization after an Interaction Quench in the Hubbard Model. *Physical Review Letters*, 103(5) :056403, July 2009. URL : <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.103.056403>, doi:10.1103/PhysRevLett.103.056403.
- [6] H. Elsayed-Ali, T. Norris, M. Pessot, and G. Mourou. Time-resolved observation of electron-phonon relaxation in copper. *Physical Review Letters*, 58(12) :1212–1215, 1987. URL : <http://journals.aps.org/prl/abstract/10.1103/PhysRevLett.58.1212>.
- [7] J. Fujimoto, J. Liu, E. Ippen, and N. Bloembergen. Femtosecond laser interaction with metallic tungsten and nonequilibrium electron and lattice temperatures. *Physical Review Letters*, 53(19) :1837–1840, 1984. URL : <http://journals.aps.org/prl/abstract/10.1103/PhysRevLett.53.1837>.

- [8] A. Georges and G. Kotliar. Hubbard model in infinite dimensions. *Physical Review B*, 45(12) :6479, 1992. URL : <http://journals.aps.org/prb/abstract/10.1103/PhysRevB.45.6479>.
- [9] A. Georges, G. Kotliar, W. Krauth, and M. Rozenberg. Dynamical mean-field theory of strongly correlated fermion systems and the limit of infinite dimensions. *Reviews of Modern Physics*, 68(1) :13, 1996. URL : http://rmp.aps.org/abstract/RMP/v68/i1/p13_1<http://journals.aps.org/rmp/abstract/10.1103/RevModPhys.68.13>.
- [10] K. Held, G. Keller, V. Eyert, D. Vollhardt, and V. Anisimov. Mott-Hubbard Metal-Insulator Transition in Paramagnetic V_2O_3 : An LDA+DMFT(QMC) Study. *Physical Review Letters*, 86(23) :5345–5348, June 2001. URL : <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.86.5345>, doi:10.1103/PhysRevLett.86.5345.
- [11] J. Hubbard. Electron Correlations in Narrow Energy Bands. *Proceedings of the Royal Society of London. Series A. Mathematical and Physical Sciences*, 276(1365) :238–257, 1963. URL : <http://rspa.royalsocietypublishing.org/content/276/1365/238.abstract>, doi:10.1098/rspa.1963.0204.
- [12] G. Keller, K. Held, V. Eyert, D. Vollhardt, and V. Anisimov. Electronic structure of paramagnetic V_2O_3 : Strongly correlated metallic and Mott insulating phase. *Physical Review B*, 70(20) :205116, Nov. 2004. URL : <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.70.205116>, doi:10.1103/PhysRevB.70.205116.
- [13] G. Kotliar and D. Vollhardt. Strongly correlated materials : Insights from dynamical mean-field theory. *Physics Today*, (March) :53–59, 2004. URL : http://www.physics.rutgers.edu/~kotliar/papers/PT-Kotliar_57_53.pdf.
- [14] B. Mansart, D. Grieger, G. Lantz, V. Balédent, N. Moisan, E. Papalazarou, A. Savoia, D. Boschetto, M. Fabrizio, and M. Marsi. Ultrafast photo-induced non-thermal phonon hardening in the Mott compound V_2O_3 . (*unpublished*), 2014.
- [15] D. B. McWhan, A. Menth, J. P. Remeika, W. F. Brinkman, and T. M. Rice. Metal-Insulator Transitions in Pure and Doped V_2O_3 . *Physical Review B*, 7(5) :1920, 1973. URL : http://prb.aps.org/abstract/PRB/v7/i5/p1920_1.
- [16] D. B. McWhan, T. M. Rice, and J. P. Remeika. Mott Transition in Cr-Doped V_2O_3 . *Physical Review Letters*, 23(24) :1384, 1969. URL : <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.23.1384>.
- [17] S.-K. Mo, H.-D. Kim, J. Allen, G.-H. Gweon, J. Denlinger, J.-H. Park, A. Sekiyama, A. Yamasaki, S. Suga, P. Metcalf, and K. Held. Filling

- of the Mott-Hubbard Gap in the High Temperature Photoemission Spectrum of $(V_{0.972}Cr_{0.028})_2O_3$. *Physical Review Letters*, 93(7) :076404, Aug. 2004. URL : <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.93.076404>, doi:10.1103/PhysRevLett.93.076404.
- [18] S.-K. Mo, H.-D. Kim, J. Denlinger, J. Allen, J.-H. Park, A. Sekiyama, A. Yamasaki, S. Suga, Y. Saitoh, T. Muro, and P. Metcalf. Photoemission study of $(V_{1-x}M_x)_2O_3$ (M=Cr,Ti). *Physical Review B*, 74(16) :165101, Oct. 2006. URL : <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.74.165101>, doi:10.1103/PhysRevB.74.165101.
- [19] N. Mott. The basis of the electron theory of metals, with special reference to the transition metals. *Proceedings of the Physical Society. Section A*, 62(7) :416, 1949. URL : <http://iopscience.iop.org/0370-1298/62/7/303>.
- [20] N. Mott and R. Peierls. Discussion of the paper by de Boer and Verwey. In *Proceedings of the Physical Society*, volume 72, 1937. URL : <http://iopscience.iop.org/0959-5309/49/4S/308>.
- [21] L. Perfetti, P. Loukakos, M. Lisowski, U. Bovensiepen, H. Berger, S. Biermann, P. Cornaglia, A. Georges, and M. Wolf. Time Evolution of the Electronic Structure of 1T-TaS₂ through the Insulator-Metal Transition. *Physical Review Letters*, 97(6) :1–4, Aug. 2006. URL : <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.97.067402>, doi:10.1103/PhysRevLett.97.067402.
- [22] L. Perfetti, P. A. Loukakos, M. Lisowski, U. Bovensiepen, H. Eisaki, and M. Wolf. Ultrafast Electron Relaxation in Superconducting $Bi_2Sr_2CaCu_2O_{8+\delta}$ by Time-Resolved Photoelectron Spectroscopy. *Physical Review Letters*, 99(19) :197001, Nov. 2007. URL : <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.99.197001>, doi:10.1103/PhysRevLett.99.197001.
- [23] T. Saha-Dasgupta, O. K. Andersen, J. Nuss, A. I. Poteryaev, A. Georges, and A. I. Lichtenstein. Electronic structure of V_2O_3 : Wannier orbitals from LDA- NMTO calculations. *arXiv preprint arXiv : ...*, pages 1–22, 2009. URL : <http://arxiv.org/abs/0907.2841>, arXiv:arXiv:0907.2841v1.
- [24] H. Sasaki, H. Harashina, K. Kodama, M. Sato, S.-i. Shamoto, M. Nishi, and K. Kakurai. Neutron Scattering Study on Metal-Insulator Transitions of BaCoS₂ Induced by External Pressure and by Ni-Doping. *Journal of the Physical Society of Japan*, 67(12) :4235–4242, 1998. URL : <http://journals.jps.jp/doi/abs/10.1143/JPSJ.67.4235>.
- [25] M. Schiró and M. Fabrizio. Time-Dependent Mean Field Theory for Quench Dynamics in Correlated Electron Systems. *Physical Review Letters*, 105(7) :1–4, Aug. 2010. URL : <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.105.076401>, doi:10.1103/PhysRevLett.105.076401.

-
- [26] Y. Yasui, H. Sasaki, M. Sato, M. Ohashi, Y. Sekine, C. Murayama, and N. Mori. Studies of Pressure-Induced Mott Metal-Insulator Transition of BaCoS_2 . *Journal of the Physical Society of Japan*, 68(4) :1313–1320, 1999.
URL : <http://journals.jps.jp/doi/abs/10.1143/JPSJ.68.1313>.