

## Résumé

Les électrons  $4f$  sont fortement localisés et leurs répulsions coulombiennes intersites sont évaluées comme plus larges que leurs largeurs de bande. Parmi tous les lanthanides, le cérium est particulièrement fascinant. Ceci s'explique par la forte hybridation avec les bandes  $6s-6p-5d$  qui se situent toutes au niveau de Fermi. L'origine de l'effondrement du volume lors de la transition isostructurale  $\gamma - \alpha$  est une énigme difficile à résoudre depuis sa découverte en 1927 [1].

Expérimentalement, la transition  $\gamma - \alpha$  se réalise seulement à température finie. Récemment, des mesures très précises de diffraction aux rayons X ont confirmé le caractère isostructural (groupe  $Fm\bar{3}m$ ) de premier ordre [2].

À partir des premiers principes, nous avons caractérisé la transition de phase  $\gamma - \alpha$  du cérium par une méthode utilisant une fonction d'onde Jastrow corrélée qui minimise l'énergie variationnelle de l'hamiltonien relativiste scalaire. L'ansatz variationnel traite les corrélations de manière non-perturbative et reproduit les propriétés des deux phases en accord avec l'expérience. Cela prouve que même à température nulle, la transition est toujours de premier ordre avec des paramètres *ab initio* qui sont sans aucun doute reliés aux mesures obtenues par l'expérience à température finie  $T$ . Nous montrons que la transition est liée à un réarrangement complexe de la structure électronique qui affecte en même temps la localisation des orbitales  $t_{1u}$  (leur répulsion coulombienne) et le caractère de la liaison chimique.

## Références

- [1] P. W. Bridgman. *Proc. Am. Acad. Arts. Sci.*, 62 :207, 1927.
- [2] F Decremps, L Belhadi, D L Farber, K T Moore, F Occelli, M Gauthier, A Polian, D Antonangeli, C M Aracne-Ruddle, and B Amadon. *Phys. Rev. Lett.*, 106 :065701, 2011.