

Séminaire du SPEC
Jeudi 8 février 2007, 14h00

Bt. 774 - Salle Claude ITZYKSON
Centre d'Etudes de Saclay, Orme des Merisiers
91191 Gif-sur-Yvette

ATTENTION : jour et heure inhabituels

Accueil café 15 minutes auparavant

**Calculs de structure électronique
pour des matériaux fortement corrélés**

Silke BIERMANN
(Ecole Polytechnique)

Ces dernières années, de nouvelles méthodes ont été développés pour la description de la structure électronique des matériaux fortement corrélés. La combinaison de techniques de champs moyen dynamique (DMFT) avec la théorie de la fonctionnelle de densité (DFT-LDA) permet de calculer les propriétés spectrales des matériaux à partir des premiers principes, en tenant compte des effets des interactions fortes de Coulomb.

Après une introduction aux calculs ab initio ainsi qu'à la théorie du champs moyen dynamique, nous allons décrire des avancées récentes dans le domaine en prenant comme exemples des oxydes de métaux de transition notamment le VO₂ et le V₂O₃.

Invitant :

Organisateurs séminaires :

Myriam PANNETIER tel : 01 6908 7410 email : mp@dsm-mail.saclay.cea.fr

Xavier WAIN TAL tel : 01 6908 9488 email : waintal@dsm-mail.saclay.cea.fr

Pour recevoir ces annonces par courrier électronique : semspec@spec.saclay.cea.fr

[http ://www-drecom.cea.fr/drecom/spec/Agenda/](http://www-drecom.cea.fr/drecom/spec/Agenda/)