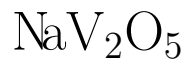


# Structure électronique et transition de phase du



Marie-Bernadette Lepetit

*CRISMAT*

*ENSICAEN / CNRS UMR6508*

*6 bd. Maréchal Juin, CAEN, France*

Le composé  $\alpha'\text{NaV}_2\text{O}_5$  est un système qui présente une transition de phase à 34 K couplant des degrés de liberté de réseau, de charge et de spins. A l'origine pensée comme une transition de spin-Peierls, il a rapidement été montré que cette transition faisait aussi intervenir les degrés de liberté de charge au travers d'une mise en ordre lors de la transition. La nature de cette transition, son origine microscopique, l'amplitude de la mise en ordre ont données lieu à de nombreuses controverses au cours des dernières années, tant du point de vue expérimental que théorique.

Le présent exposé fera le point sur les résultats expérimentaux et leur apparentes contradictions, ainsi que sur les différentes hypothèses de l'origine de la transition. Il montrera ensuite, comment les calculs ab-initio ont permis de comprendre le couplage particulier existant dans ce composé entre les degrés de liberté de charge, spin et de réseau et comment ils ont permis d'élucider la nature de la transition de phase. Il s'attachera à donner une vision globale de l'origine microscopique de la transition et à réinterpréter au vue de ce modèle certains résultats expérimentaux apparemment contradictoires. Une attention particulière sera portée à la méthodologie du calcul ab initio et aux mécanismes physiques devant être traités pour obtenir des résultats fiables.

1. Marie-Bernadette LEPETIT, *Recent Research Developments in Quantum Chemistry 3*, p. 143, Transword Research Network (2002).
2. Nicolas SUAUD et Marie-Bernadette LEPETIT, *Phys. Rev. B* **62** 402 (2000).
3. Nicolas SUAUD et Marie-Bernadette LEPETIT, *Phys. Rev. Letters* **88**, 056405 (2002).