



DIRECTION DES SCIENCES DE LA MATIÈRE,  
INSTITUT RAYONNEMENT MATIÈRE DE SACLAY  
SERVICE DE PHYSIQUE ET DE CHIMIE DES SURFACES ET DES INTERFACES

# SEMINAIRE

Mercredi 12 Juin 2013 à 11h00  
Bâtiment 466, salle 111 - CEA Saclay, 91191, Gif sur Yvette

## Quantum mechanical simulation of magnetic alloys: the correct tight-binding Hamiltonian

Marc EA Coury<sup>†</sup>

Theory and Simulation of Materials  
Whiteley Suite, RCS1 Building  
Imperial College London  
Exhibition Road  
London, SW7 2AZ, UK  
(invité par Cyrille BARRETEAU)

A realistic model of steel under extreme conditions, such as occurs in a fusion reactor, must include a proper description of non-collinear magnetism. In the presented work we take a bottom up approach. We derive a multi-orbital Hubbard Hamiltonian, which is exact for single atoms, and find its mean field approximation, suitable for a tight binding model.

### <sup>†</sup>Attention: Date Inhabituelle

*Formalités d'entrée: Contacter le secrétariat pour l'établissement de votre autorisation d'entrée sur le centre de Saclay. Tel : 01.69.08.65.32 ou 01.69.08.40.12; Fax : 01.69.08.40.44 ; e-mail : catherine.julien@cea.fr. Le délai minimum est de 24 heures pour les visiteurs ressortissants des pays de l'Union Européenne, et de huit jours pour les autres. Sans autorisation, vous ne pourrez entrer sur le centre de Saclay. Dans tous les cas, se munir d'une pièce d'identité.*