

Responsable :  
Martine Logé  
☎ 01 69 08 51 67

# SEMINAIRE



**Service de Recherches de Métallurgie Physique**  
DEN/DANS/DMN

Salle de réunion du SRMP – Bâtiment 520 – Pièce 109

## ***Description des fortes interactions électroniques par les méthodes LDA+U et LDA+DMTF***

***Bernard AMADON***

*CEA- DAM-DIF/DPTA/SPMC*

La description de systèmes formés d'éléments contenant des couches 3d, 4f ou 5f partiellement remplies est souvent un échec pour les approximations usuelles (LDA, GGA) de la théorie de la fonctionnelle de la densité. On peut attribuer cela aux fortes interactions entre les électrons se trouvant dans ces orbitales très localisées. Une façon de corriger la DFT-LDA/GGA est de prendre en compte explicitement ces interactions locales dans la description du système. Les méthodes LDA+U et LDA+DMFT correspondent alors à deux façons de résoudre ce problème. L'objectif du séminaire sera de les décrire et d'illustrer leur application à des isolants et des métaux corrélés.

**Mercredi 12 mai 2010 à 10h30**

**N.B :**

***Les visiteurs de nationalité étrangère hors Union Européenne sont priés de bien vouloir avertir impérativement 3 semaines à l'avance – les visiteurs de l'Union Européenne 1 ou 2 jours avant le séminaire – le Secrétariat du Service de leur entrée sur le Centre :  
Tel : 01 69 08 66 64 – Fax : 01 69 08 68 67***