# SEMINAIRE



### Service de Recherches de Métallurgie Physique

**DEN/DANS/DMN** 

Salle de réunion du SRMP - Bâtiment 520 - Pièce 109

## Interactions magnétiques dans CsV<sub>2</sub>O<sub>5</sub> où sont les dimères ?



*N.B* :





#### **Andrés Saúl**

Centre Interdisciplinaire de Nanoscience de Marseille - CNRS Campus de Luminy, Marseille

#### **Guillaume Radtke**

Institut Matériaux Microélectronique Nanoscience de Provence Faculté des Sciences de Saint-Jérôme, Marseille

The study of low dimensional spin-1/2 quantum systems has been a very prolific field of condensed matter physics during the last decades. The family of vanadates, in particular, has provided a rich variety of compounds with different behaviors and topologies.

In this framework, the sole consideration of the topology of a compound, usually based on a simple analysis of the distances separating the magnetic centers, is often incomplete and even misleading.

In this work, the magnetic properties of the layered compound  $CsV_2O_5$  have been investigated using density-functional calculations. Through an extensive use of the broken symmetry formalism in DFT, we propose a new picture of  $CsV_2O_5$  where "structural" and "magnetic" dimers are distinct from each other. More generally, we demonstrate that non magnetic bridging units, such as  $[V^{5+}O_4]^{3-}$  tetrahedra, play a preponderant role in mediating strong and long ranged anti-ferromagnetic interactions in this system.

#### Mercredi 9 mars 2011 à 10h30

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

Commissariat à l'énergie atomique et aux énergies alternatives Centre de Saclay - Bât 520 - 91191 Gif-sur-Yvette Cedex - France Service de Recherches de Métallurgie Physique Séminaires - Martine Logé : Tél. : 01 69 08 51 67 – Fax. : 01 69 08 68 67

