
Propriétés magnétiques et de transferts électroniques dans les matériaux : approche ab initio des interactions électron-électron

Vincent Robert*¹

¹Laboratoire de Chimie Quantique, UMR 7177 (LCQ) – université de Strasbourg, CNRS : UMR7177 –
1, rue Blaise Pascal 67000 Strasbourg, France

Résumé

L'étude des systèmes complexes par les méthodes de chimie quantique permet d'accéder à des informations microscopiques susceptibles de gouverner les propriétés observées. L'objectif est d'élaborer, au contact de l'expérience, des chemins d'analyse en veillant au respect des caractères quantitatif et déductif pour mieux définir les objets futurs. Dans cette présentation, nous nous efforcerons de montrer comment l'utilisation et le développement de méthodes d'interaction de configurations permet de répondre aux questions de (i) transport électronique, (ii) transition de spin, et (iii) caractérisation des états à transfert de charge. Nous soulignerons la pertinence d'une lecture basée sur les orbitales moléculaires localisées visant à concentrer l'information ab initio, réduire l'effort numérique, et gagner en interprétation.

Mots-Clés: calculs ab initio, transport électronique, systèmes complexes

*Intervenant