

Séminaire SOLEIL

Méthodes ab-initio pour le calcul des spectroscopies d'absorption X

Oana BUNAU*(Institut Néel, Grenoble)*

Invitée par Nicolas JAOUEN

**Lundi 15 novembre à 14h00
Grand Amphi SOLEIL**

Les outils actuels de simulation des spectroscopies d'absorption (absorption X, diffraction résonnante, dichroïsme circulaire magnétique) manquent souvent de précision dans la description des spectres expérimentaux. Parmi les nombreuses techniques de calcul, les plus répandues sont celles dites "monoélectroniques" utilisant la fonctionnelle densité (DFT) et les méthodes de type multiplet.

Les premières réussissent généralement à reproduire les seuils K, alors que les multiplets sont plutôt appropriés pour les seuils L23 et M45. Le travail présenté ici a pour but de montrer l'évolution actuelle des techniques qui permettent d'améliorer les accords calcul - expérience.

Je vais présenter une procédure de calcul qui permet une estimation automatique du niveau de Fermi, puis la prise en compte partielle des effets multiélectroniques via une méthode basée sur la DFT dépendante du temps. Nos méthodes seront illustrées par des exemples sur des matériaux simples (éléments 3d) ainsi que sur des composés complexes (BaVS₃, manganites, ...) en absorption en diffraction résonnante. Toutes ces nouvelles fonctionnalités sont disponibles dans le code FDMNES.

**Ce séminaire sera suivi d'une pause-café**

Formalités d'entrée : accès libre dans l'amphi du Pavillon d'Accueil. Si la manifestation a lieu dans le Grand Amphi Soleil du Bâtiment Central, merci de vous munir d'une pièce d'identité (à échanger à l'accueil contre un badge d'accès).

SYNCHROTRON SOLEIL

Division Expériences - L'Orme des merisiers - Saint-Aubin - BP 48 - 91192 GIF S/YVETTE Cedex

<http://www.synchrotron-soleil.fr/portal/page/portal/Soleil/ToutesActualites>Secrétariat Division Expériences : sandrine.vasseur@synchrotron-soleil.fr