

Détermination Ab Initio du couplage magnétique dans les oxydes de Cobalt et de Manganèse.

Alain Gellé,

Institut de Physique de Rennes, UMR 6251, 263 Avenue du General Leclerc - 35042 RENNES CEDEX

Marie-Bernadette Lepetit

Laboratoire CRISMAT, UMR 6508, 6 boulevard Maréchal Juin, 14050 CAEN Cedex 4

Les oxydes de métaux de transition présentent de nombreuses propriétés remarquables (magnéto-résistance colossale, supraconductivité, fort pouvoir thermoélectrique). Très souvent, la description physique de ces systèmes ne peut se limiter à une simple structure de bandes. En effet, dû à la forte localisation des électrons sur les orbitales d des métaux de transition, les énergies liées aux interactions entre les électrons de valence sont du même ordre de grandeur que leur énergie cinétique. Afin d'appréhender la physique de ces systèmes, il s'avère nécessaire de déterminer dans un premier temps des Hamiltoniens modèles qui décrivent les différentes interactions microscopiques liés à ces deux phénomènes : intégrales de saut pour la partie cinétique, couplages magnétiques, répulsions (...) pour les interactions électrons-électrons. C'est le rapport entre ces différents termes qui va déterminer le comportement des différents degrés de liberté mis en jeu (liberté de charge, de spin ou d'orbitale) et, in fine, les propriétés du système. L'évaluation précise des interactions mises en jeu est donc cruciale.

Du fait de la localisation électronique il est possible d'extraire ces paramètres effectifs par une étude ab initio locale. Dans cette approche, l'utilisation des méthodes d'Interaction de Configuration (IC) issues de la chimie quantique permet d'obtenir des résultats précis pour ces systèmes fortement corrélés. Ces approches ab initio permettent en effet de traiter correctement, à la fois la corrélation de valence au sein des orbitales d, et les effets d'écrantage (corrélation dynamique) qui renormalisent les interactions. Malheureusement, dans le cas des méthodes classiques d'IC, le coût du calcul devient prohibitif lorsque le nombre de couches ouvertes par atome est supérieure à 2. Ces approches ont donc été très utilisées pour l'étude des oxydes de cuivre ou de nickel, mais n'ont pu être appliquée à l'étude de nombreux oxydes de cobalt ou de manganèse.

Nous avons donc développé une méthode d'IC qui permet de traiter des systèmes à nombreuses couches ouvertes. La sélection des configurations est effectuée en se basant sur une analyse perturbative des mécanismes microscopiques à l'origine des interactions locales. Cette sélection des configurations permet de réduire considérablement la taille du calcul sans en altérer la précision. Nous présentons la méthode ainsi que son application à l'étude de composés d'oxyde de nickel (KNiF_3), de cobalt (Ba_2CoS_3) et de manganèse (YMnO_3).