



Contribution ID : 2

Type : **not specified**

## **Estudio de la estructura electrónica de MF<sub>2</sub> (M=Cr-Zn) por espectroscopías de absorción ( $\bar{XAS}$ ) y emisión normal (NXES) y resonante inelástica de rayos X (RIXS).**

*Wednesday, 4 May 2011 16:30 (0:30)*

### **Abstract content**

Un estudio detallado de la estructura electrónica de la familia de compuestos altamente correlacionados MF<sub>2</sub> (M=Cr-Zn) es hecha combinando espectroscopías de absorción (XAS) y emisión normal (NXES) y resonante inelástica (RIXS) de rayos X. Nuestros hallazgos muestran que a pesar de ser compuestos idealmente iónicos existe una fuerte covalencia (hibridación) entre los estados F2p y M3d alrededor del nivel de Fermi. Adicionalmente su naturaleza iónica dominante nos permite identificar y medir de manera puntual los efectos de la fuerte correlación electrónica presente. Teóricamente los espectros XAS en las orillas L<sub>{2,3}</sub> del metal son reproducidos excelentemente por la teoría del multiplete atómico con inclusión del campo cristalino (LFM), los parámetros relevantes son reportados por primera vez en un estudio sistemático. Sendos mapas de espectros RIXS entre las orillas L<sub>{2,3}</sub> para todos los metales estudiado son presentados también y reproducidos de manera muy satisfactoria por cálculos LFM usando la expresión de Kramers-Heisenberg para procesos coherentes de dos fotones. Con ello las excitaciones neutras d-d y de transferencia de carga son identificados sin ambigüedad entre sí y de los canales de fluorescencia normal. Por primera vez, usando NXES se observa la transición de aislantes tipo Mott-Hubbard a aislantes de transferencia de carga en una familia de compuestos, en particular los MF<sub>2</sub>. De combinar XAS y NXES en la orilla K de Fluor se deducen por primera vez de manera directa los parámetros de transferencia de carga ( $\Delta_{CT}$ ) y de correlación electrónica entre los electrones 3d ( $U_{dd}$ ) de los metales de transición. El acuerdo con el modelo de fluctuaciones de carga de Zaanen-Sawatzky-Allen es excelente. Nuestra aproximación puede ser extendida a otros sistemas. Cálculos de las densidades de estados proyectadas (ocupadas y desocupadas) en el metal y en el Fluor usando LDA+U están también en acuerdo con nuestros hallazgos experimentales.

### **Summary**

**Primary author(s) :** Mr. OLALDE VELASCO, Paul (Instituto de Ciencias Nucleares UNAM)

**Co-author(s) :** Prof. JIMÉNEZ-MIER, José (ICN-UNAM); Dr. YANG, Wanli (ALS-LBNL); Dr. DENLINGER, Jonathan (ALS-LBNL); Dr. DE LA MORA, Pablo (Facultad de Ciencias-UNAM)

**Presenter(s) :** Mr. OLALDE VELASCO, Paul (Instituto de Ciencias Nucleares UNAM)