

Электронная структура сильно коррелированных соединений иттербия

Усачёв Дмитрий Юрьевич

Санкт-Петербургский государственный университет,

Московский физико-технический институт

Ключевые слова: электронная структура, сильно коррелированные системы, фотоэлектронная спектроскопия.

Понимание деталей электронной структуры вблизи уровня Ферми необходимо для объяснения необычных физических свойств сильно коррелированных материалов, содержащих атомы лантаноидов. Эти тонкие особенности, часто возникающие из-за тонкого расщепления 4f-состояний, обусловленного их гибридизацией с коллективизированными состояниями и влиянием кристаллического электрического поля, определяют уникальное низкотемпературное поведение этих материалов. Электронную структуру традиционно моделируют в рамках теории функционала плотности (DFT), которая аппроксимирует многоэлектронную задачу модельной системой невзаимодействующих электронов, движущихся в эффективном потенциале. Используемые в DFT приближения часто не позволяют воспроизвести тонкие особенности сильно коррелированных систем, что приводит к неполному или даже вводящему в заблуждение описанию их тонкой электронной структуры. В экспериментальных исследованиях электронной структуры богатую информацию дает фотоэлектронная спектроскопия. Однако из-за высокой поверхностной чувствительности часто бывает трудно различить объемные и поверхностные электронные состояния. В докладе будут рассмотрены экспериментальные результаты фотоэмиссионных исследований электронной структуры соединений YbRh_2Si_2 и YbIr_2Si_2 с тяжелыми фермионами [1], а также предложена простая модель, позволяющая подправить DFT-расчет для получения хорошего согласия с экспериментом, что в свою очередь позволило дать надежную интерпретацию данных фотоэлектронной спектроскопии.

[1] D.V. Vyalikh, PRL 105, 237601 (2010); S. Danzenbächer, PRL 107, 267601 (2011).